

ANNALEN DER PHYSIK

5. FOLGE • BAND 32 • HEFT 5 • JULI 1938

Zur Theorie der Intensitätsanomalien der Beugung

Von Ugo Fano

(Mit 9 Abbildungen)

Inhaltsübersicht: 1. Einleitung. — 2. Woods optische Anomalien: Historisches. — 3. Konsequente Entwicklung der Rayleigh-Voigtschen dynamischen Theorie der Gitter. — 4. Woods optische Anomalien: Diskussion. — 5. Die Anomalien der Reflexion und Beugung von Molekularstrahlen. — 6. Die Zusammenhänge mit einigen Beugungsanomalien von X-Strahlen und Elektronenstrahlen (Kossel- und Kikuchi-Kegel und besonders Kikuchi-Enveloppen). — 7. Schlußbemerkungen. — Anhang I: Zur Deutung der Fortpflanzung elektromagnetischer Wellen aus komplexer Einfallsrichtung durch die Stromlinien der Energie. — Anhang II: Zum Veranschaulichen der Quasi-Eigenschwingungen. — Anhang III: Die Interferenzeffekte der Dispersionsformel.

1. Einleitung

Wenn eine — optische oder materielle — monochromatische Welle auf ein Gitter¹⁾ einfällt, dessen Periodizität von der Größenordnung der Wellenlänge ist, treten bekanntlich mehrere Beugungsbilder der Quelle auf. Die Energie der einfallenden Welle verteilt sich zwischen den verschiedenen Beugungsbildern; ein Teil derselben kann jedoch vom Gitter absorbiert, d. h. in andere physikalische Formen verwandelt werden. Die Gesetze, die die Lage der Beugungsbilder feststellen, sind längst wohlbekannt und ziemlich einfach. Die Berechnung der *Intensität* der einzelnen Beugungsbilder ist dagegen verwickelt und wurde in den allgemeinen Fällen nicht ausgeführt. Das hängt wesentlich von den mathematischen Schwierigkeiten ab, denn die Gleichung der Wellen mit ihren Nebenbedingungen ist auch im Gitter sehr oft befriedigend oder auch exakt bekannt. Z.B.: ein optisches Gitter ist ein System von zwei homogenen isotropen Medien, deren Grenze eine periodische Form hat; das Beugungsproblem für ein solches System ist mathematisch leicht herzustellen und streng bestimmt, aber exakt nicht lösbar. Vielmehr sind in den einzelnen physikalisch verschiedenen Fällen geeignete Näherungsmethoden zu benutzen.

1) Als Gitter bezeichnen wir ein zwei- oder dreidimensionales Raumgebiet, in dem die physikalischen Eigenschaften des Mediums periodische Funktionen des Ortes sind.

Selbstverständlich wird die Untersuchung solcher Methoden erst dann unternommen, wenn aus besonderen Gründen die Intensitätsverteilung in einem Beugungsversuch wichtig ist. Im allgemeinen hat man sich auf die Bemerkung beschränkt, daß die Intensität eines Beugungsbildes der Quelle eine ziemlich glatte Funktion der physikalischen Parameter (Wellenlänge, Lage der Quelle usw.) ist. Dazu kann man leicht andere grobe Eigenschaften finden. Z.B.: in einem optischen Reflexionsgitter, wenn die Streifen schmal mit großen glatten Intervallen sind, wird die regelmäßig reflektierte Welle sehr intensiv und dagegen die gebeugten Wellen schwach sein, und umgekehrt.

Obwohl die Intensität einer gebeugten Welle *allgemein* eine langsam veränderliche Funktion der Beugungsparameter ist, hat man in manchen Versuchen mit optischen und materiellen Wellen Sonderfälle gefunden. Diese *Anomalien* wurden sowohl von den experimentellen als von den theoretischen Physikern diskutiert.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist, weitere Beiträge zur Erklärung besonders optischer Anomalien zu bringen und zugleich eine Reihe von Anomalien in verschiedenen Gebieten der Physik von einem möglichst einheitlichen Gesichtspunkt zu diskutieren. Der den folgenden Ausführungen entsprechende mathematische Formalismus ist oft unanschaulich; weiter sind die Endformeln schwer mit der Erfahrung vergleichbar, da die experimentellen Bedingungen nicht scharf genug sind, um die in der Theorie enthaltenen Anfangsdaten genau zu liefern. Deswegen habe ich im Laufe der ganzen Arbeit versucht, mehr den Gedankengang und den physikalischen Inhalt der Theorie zu veranschaulichen als den mathematischen Formalismus ausdrücklich durchzuführen.

2. Woods optische Anomalien: Historisches

Seit 1902 hat Wood¹⁾ mehrmals metallische Reflexionsgitter studiert, die merkwürdige Anomalien in der Intensität der Beugungsspektren als Funktion der Wellenlänge und des Einfallswinkels zeigten. Diese Anomalien sind in der folgenden Versuchsanordnung besonders auffallend. Bei Benutzung einer Quelle *weißen Lichtes* sind ihre Beugungsbilder spektral zerlegt; angenommen, daß die spektrale Zusammensetzung der Quelle in einem gewissen Intervall konstant ist, bedeutet der Intensitätsverlauf eines Beugungsspektrums „Intensität des Beugungsbildes als Funktion der Wellenlänge“. Der Intensitätsverlauf bei verschiedenen Einfallswinkeln und Spektren verschiedener Ordnungen liefert eine Reihe wichtiger Daten über das betreffende Gitter.

1) R. W. Wood, Phil. Mag. 4. S. 396. 1902; 23. S. 310. 1912; Phys. Rev. 48. S. 928. 1935.

Mit dieser Anordnung hat Wood bemerkt, daß einige Gitter helle und dunkle Banden aufweisen, deren Ränder manchmal sehr scharf sind. Bei stetiger Änderung des Einfallswinkels verschieben sich die Banden im Spektrum auch stetig; eine plötzliche Verschiebung wird dagegen durch Aufsetzen einer durchsichtigen materiellen Schicht auf das Gitter hervorgerufen. Die Spektren verschiedener Ordnung zeigen allgemein *ceteris paribus* Banden derselben Wellenlänge. Die Banden verschwinden, wenn das elektrische Feld parallel zu den Gitterstreifen polarisiert ist. Sind die Streifen des Gitters breit, so kann eine leichte Abbürstung des Gitters genügen, um die Banden verschwinden zu lassen; dies geschieht jedoch nicht, wenn die Streifen schmal sind. Ein Gitter mit Anomalien kann man nicht nach Belieben bauen; das Auftreten der Banden ist sehr launisch. Diese und andere Eigenschaften bilden einen eigenartigen Komplex, der zuerst völlig unverständlich war. Die Meinung, daß die Banden einfach durch oberflächliche Unreinheit entstehen, ist wegen der (zwar kleinen) Gesetzmäßigkeiten der Erscheinung nicht zu halten.

Einen wesentlichen Schritt machte 1907 Rayleigh¹⁾. Er bestätigte in den ersten Woodschen Daten folgende Regel: die Wellenlänge einer Anomalie in einem Beugungsspektrum bildet bei festem Einfallswinkel die Grenze eines Spektrums höherer Ordnung; d. h. es gibt ein Spektrum höherer Ordnung, in dem das Licht dieser Wellenlänge tangentiell vom Gitter austritt, so daß größere Wellenlängen in jenem Spektrum nicht mehr vorhanden sind (Abb. 1).

Darauf folgte alsbald die Aufstellung der dynamischen Gittertheorie²⁾. Ihre mathematische Entwicklung ist in der allgemeineren Behandlung des folgenden Abschnitts enthalten; hier werden nur ihre qualitativen Züge skizziert. Eine ebene monochromatische polarisierte Welle fällt auf ein vollkommen reflektierendes Gitter ein; die Intensität der einzelnen gebeugten Wellen soll berechnet werden. Man benutzt mathematisch Potenzreihenentwicklungen nach der Tiefe der Gitterstreifen: in nullter Näherung gibt es keinen Streifen (und physikalisch keine gebeugte Welle). Daher enthält die Intensität der gebeugten Wellen nur Glieder erster und höherer Ordnung; diese letzten Glieder haben die Bedeutung einer Wechselwirkung zwischen den verschiedenen gebeugten Wellen oder vielleicht einer mehrfachen Beugung. Wenn das magnetische Feld parallel zu den Streifen polarisiert ist, und es eine gebeugte Welle gibt,

1) Lord Rayleigh, Phil. Mag. 14. S. 60. 1907.

2) Lord Rayleigh, Proc. Roy. Soc. (A) 79. S. 399. 1907.

die parallel zum Gitter läuft — *Rayleighsche Bedingung* — divergiert ihre Intensität schon in erster Näherung; automatisch divergieren daher die Intensitäten aller anderen gebeugten Wellen von der zweiten Näherung ab.

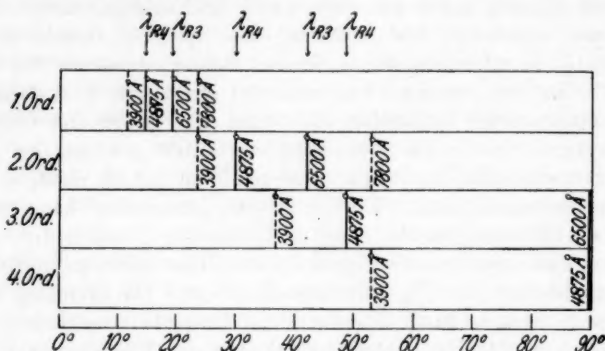


Abb. 1. Analyse eines Spektrums in den verschiedenen Ordnungen. Die Wellenlängen λ_{R3} (6500 Å) und λ_{R4} (4875 Å) bilden die Grenzen der Spektren 3. bzw. 4. Ordnung; sie treten in jedem Spektrum als „Rayleighsche Wellenlänge“ auf

Mathematisch bedeutet zunächst diese Divergenz, daß in den Rayleighschen Bedingungen (von jetzt an: R.B.) die benutzte Näherungsmethode ungeeignet ist; andererseits ist es physikalisch zu erwarten, daß das Auftreten der R.B. eine allgemeine Bedeutung für die *Anomalien* hat. Zwei typische Züge der Woodschen Erscheinungen: gleichzeitiges Auftreten in den Spektren aller Ordnungen und Abhängigkeit von der Polarisierung werden schon damit erklärt.

Wir wollen nun versuchen die physikalische Bedeutung der R.B. klar zu machen. Das Auftreten einer parallel zum Gitter gebeugten Welle ist — nach dem auf dem Huyghenschen Prinzip begründeten Beugungsmodell — mit der Bedingung gleichbedeutend, daß der Weg von der Quelle zu einem streuenden Streifen *A* und von diesem zum benachbarten Streifen *B* eine ganze Zahl Wellenlängen länger als der direkte Weg von der Quelle zu *B* ist¹⁾ (vgl. Abb. 2). Wenden wir nun das naive Modell der Beugung an: „jeder Streifen streut unabhängig und die Beugungsbilder entstehen durch die Interferenz der gestreuten Wellen“, so sehen wir, daß die Beugung bei R.B. in physikalisch verwickelter Weise geschieht. *A* liege z. B. links von *B*; für alle Streifen, die links von *A* liegen,

1) Dasselbe gilt zufolge auch falls *A* und *B* nicht benachbart sind.

stimmen dann die Phasen der gestreuten Wellen in B überein, und ihre Resultante kann mit der einfallenden Welle merkliche Interferenzeffekte zeigen¹⁾. Diese Interferenzeffekte sind für die Intensität der Schwingung in B und der von B ausgehenden Welle maßgebend: d. h. die Streifen streuen gar nicht unabhängig voneinander; unser — allgemein befriedigendes — Modell der Beugung zeigt sich also ungeeignet.

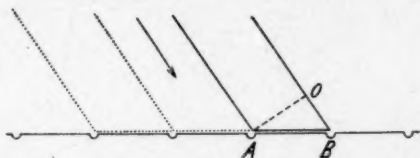


Abb. 2. Zur Veranschaulichung der Rayleighschen Bedingung.
(Bei R.B.: $AB - OB = n\lambda$)

Allgemein können wir sagen, daß bei R.B. die Beugung unanschaulich geschieht; vielleicht kann man von „mehrfacher Beugung“ sprechen. Näherungsmethoden, die direkt oder indirekt auf dem naiven Modell begründet sind, können divergieren und wir können allgemeiner annehmen, daß die R.B. einen singulären Fall der Beugung bilden. Es folgt aber natürlich nicht, daß die R.B. immer Anomalien mit sich bringen.

Voigt²⁾ hat später die Rayleighsche Theorie auf den Fall unvollständig reflektierender Gitter erweitert und gezeigt, daß in diesem der Wirklichkeit näheren Fall keine Unendlichkeitsstelle mehr vorhanden ist. Diese Arbeit wird auch im nächsten Abschnitt näher diskutiert. Voigt vergleicht jedoch nicht seine Resultate mit den Woodschen Erscheinungen.

1935 haben Strong³⁾ und Wood⁴⁾ wieder Gitter studiert, die anomale Banden zeigten. Besonders wurde das Strongsche Gitter C von beiden Forschern untersucht und als typisch angesehen. Dieses Reflexionsgitter wurde mit verschiedenen dünnen metallischen oberflächlichen Schichten bedeckt, die ziemlich leicht abgerissen werden konnten. Die Änderung der Natur der Metallschicht beeinflusst stark die quantitativen doch nicht die qualitativen Züge der Banden. Die Möglichkeit viele Metallschichten auf demselben Gitter zu untersuchen war natürlich sehr günstig, um eine Menge experimentelle Daten zu vergleichen. Die Streifen sind im Gitter C schmal und die Beugungsbilder schwach. Die Banden sehen so aus (vgl. Abb. 3): wenn wir

1) Der Phasenunterschied in der Interferenz ist gleich der Phasenverschiebung im ersten Streuvorgang an den Streifen.

2) W. Voigt, Gött. Nachrichten 1911. S. 40.

3) J. Strong, Phys. Rev. 49. S. 291. 1936.

4) R. W. Wood, a. a. O.

im Spektrum vom Violett nach Rot fortschreiten, treffen wir an den Wellenlängen, die den R.B. genügen (*Rayleighschen Wellenlängen*),

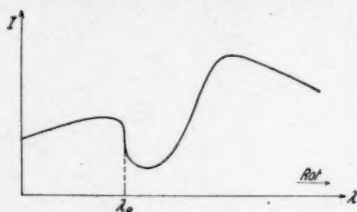


Abb. 3. Schematischer Verlauf der Intensität in den Banden des Gitters C

einen un stetigen Abfall der Intensität — *Kante* —, dem eine *dunkle* etwa 100 Å breite *Bande* folgt. Dann steigt die Intensität wieder ziemlich steil bis zu *außerordentlich* großen Werten; man findet also eine *breite sehr helle Bande*, die langsam in ein Gebiet mittelgroßer Intensität endet. Die spektrale Breite der ganzen

Erscheinung hängt von der Natur der Metallschicht und von der spektralen Lage ab.

Wood hat selbst diese und andere Eigenschaften sorgfältig diskutiert ohne eine befriedigende Erklärung zu erreichen. Es war ihm besonders unverständlich, daß die Anomalien so weit von den *Rayleighschen Wellenlängen* reichen.

Erstes Ziel meiner Untersuchung war also etwas mehr von den Woodschen Versuchen zu verstehen. Dieser Untersuchung sind zwei vorläufige Mitteilungen gewidmet, deren Entwicklung den Hauptteil der Abschn. 3 und 4 bildet¹⁾. Vor der Diskussion möchte ich nun den mathematischen Apparat vorbereiten.

3. Konsequente Entwicklung der Rayleigh-Voigtschen „dynamischen Theorie der Gitter“

Die vorliegende mathematische Durchführung folgt dem allgemeinen Gedankengang der Rayleighschen und dem mathematischen Formalismus der Voigtschen Arbeit. Sie weicht jedoch in manchen Punkten davon ab. Die Rayleighsche Problemstellung wird von einer vorläufigen Diskussion vorbereitet, die der Sommerfeldschen Methode zur Berechnung der Ausstrahlung einer Antenne sich anschließt (Methode des Fourierintegrals). Zweitens ist eine Voigtsche Überlegung (die bei ihm als wesentlich erscheint) scheinbar nicht annehmbar. Endlich werden die Rechnungen ohne die von Voigt benutzte Drudesche Näherung durchgeführt.

Wir werden das folgende Problem diskutieren: das Gitter bestehe aus einer Fläche, die zwei unendlich ausgedehnte homogene isotrope Medien, das eine leer, das andere mit der Dielektrizitäts-

1) U. Fano, Phys. Rev. 50. S. 573. 1936; 51. S. 288. 1937.

konstante ε und der Leitfähigkeit σ^1), trennt; die Grenzfläche sei der y -Achse parallel und durch die Gleichung $z = \zeta(x)$ (ζ = periodische Funktion) definiert. Eine Quelle im Vakuum strahlt eine elektromagnetische Welle der Frequenz

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} \text{ (primäre Erregung) aus; es handelt}$$

sich darum, eine Lösung der Maxwell'schen Gleichungen zu finden, die mit der Frequenz ν schwingt, der Ausstrahlungsbedingung und den Grenzbedingungen auf dem Gitter genügt, und die natürlich die primäre Erregung als Bestandteil enthalten soll. Wir fügen der primären Erregung in jedem Medium eine sekundäre Erregung — reguläre Lösung der Maxwell'schen Gleichungen — hinzu; diese Lösungen sollen durch die obigen Bedingungen bestimmt werden.

Eine allgemeine reguläre Lösung der Maxwell'schen Gleichungen in einem homogenen isotropen Medium kann bekanntlich in der Form:

$$(1) \quad \mathfrak{A} e^{i k (a x + \beta y + \gamma z - c t)}$$

dargestellt werden, wo:

$$(2) \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = \varepsilon + 4\pi i \frac{\sigma}{c k} = n^2; \quad k = \frac{2\pi \nu}{c}; \quad A_x \alpha + A_y \beta + A_z \gamma = 0$$

ist; der reelle Teil von (1) stellt, je nach der Polarisation, das elektrische oder das magnetische Feld dar. Falls α , β und γ reell sind, verhält sich (1) wie eine gewöhnliche ebene Welle; das ist jedoch nicht der allgemeinste Fall: ebene Wellen von komplexer Einfallsrichtung treten z. B. bei der Totalreflexion auf. Da der allgemeinste Fall nicht so oft zu finden ist, habe ich ihn im Anhang I näher diskutiert.

Eine Lösung (1) kann bei gegebener Frequenz durch die Werte von α und β gekennzeichnet werden: in unseren zwei Medien ist dann das Vorzeichen von γ von der Bedingung des Endlichbleiben im Unendlichen und von der Ausstrahlungsbedingung bestimmt.

Endlichbleiben $\text{Im}(\gamma) \geq 0; \quad \text{Im}(\nu) \geq 0;$

Ausstrahlungsbedingung . . . $\text{Re}(\gamma) \geq 0; \quad \text{Re}(\nu) \geq 0;$

1) Die magnetische Permeabilität setzen wir $\mu = 1$. ε und σ sind gewöhnliche Bezeichnungen für die Größen, die bei langsam veränderlichen Feldern Dielektr.-Konstante und Leitfähigkeit genannt werden. Bei rasch veränderlichen Feldern (z. B. bei optischen Wellen) ist die Sachlage anders: die große Leitfähigkeit eines Metalls äußert sich z. B. mehr in großen negativen Werten von ε als in großen positiven Werten von σ .

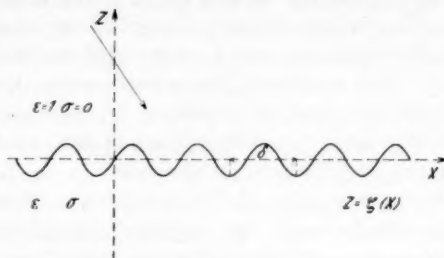


Abb. 4

v bezeichnet $-\gamma$ für $z < \zeta$, $Im(w)$ den imaginären Teil von w (d. h.: $Re(w) + i Im(w) = w$). Da in jedem Medium x und y von $-\infty$ bis $+\infty$ laufen, müssen α und β wegen der Bedingung des Endlichbleibens immer reell sein; nur γ ist komplexer Werte fähig. Die beiden Einschränkungen von γ und v sind bei reellen α und β verträglich.

Wir entwickeln die primäre sowie die sekundäre Erregung als Fourierintegral der Lösungen (1) (nach den Parametern α und β)¹⁾. Die Quelle setzen wir im Unendlichen, so daß die primäre Erregung durch eine einfache Welle mit

$$(3) \quad \alpha = \alpha_0 \leq 1, \beta = 0, Im(\gamma_0) = 0, Re(\gamma_0) < 0, \mathfrak{A} \equiv (0, E, 0)$$

dargestellt wird. Wir können nun die Grenzbedingungen, die die unbekannte sekundäre Erregung enthalten, an der Oberfläche $z = \zeta$ schreiben und als Fourierintegrale nach α und β darstellen. Damit die Grenzbedingungen befriedigt werden, müssen die Koeffizienten von $e^{ik(\alpha x + \beta y)}$ für jeden Wert von α und β verschwinden. Wir haben also vier lineare Gleichungen, (die die Stetigkeit der tangentiellen Komponenten des elektrischen und magnetischen Feldes bedingen) mit vier unbekannten Funktionen (Fourierkoeffizienten der sekundären Erregung in jedem Medium mit je zwei Polarisierungen). Wäre die Grenzfläche kein Gitter sondern eben ($\zeta = 0$), so wären die Gleichungen einfach algebraisch und wir wären zum gewöhnlichen Reflexions- und Brechungsproblem zurückgeführt. Statt dessen bedingt die Veränderlichkeit von ζ Relationen zwischen den Werten der Funktionen bei verschiedenen Werten der Parameter²⁾. In

1) Die Darstellung der sekundären Erregung als Fourierintegral kann physikalisch als Superposition von elementaren gebeugten Wellen angesehen werden; die unbekannten Fourierkoeffizienten spielen dann die Rolle von Amplituden der einzelnen gebeugten Wellen.

2) Um diese Beziehungen in einem einfachen Fall zu erläutern, betrachten wir die Gleichung

$$(a) \quad AF(x) + BG(x) = 0$$

zwischen den Größen:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha; \quad G(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha.$$

Sind A und B konstant, so ist Gl. (a) mit

$$a') \quad Af(\alpha) + Bg(\alpha) = 0$$

(für alle Werte von α) gleichbedeutend. Falls aber

$$A = A(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha; \quad B = B(x) = \int_{-\infty}^{\infty} b(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha$$

ist, erhält man:

$$(b) \quad A(x)F(x) + B(x)G(x) = \int_{-\infty}^{\infty} da \, e^{i\alpha x} \int_{-\infty}^{\infty} d\beta [a(\beta)f(\alpha-\beta) + b(\beta)g(\alpha-\beta)] = 0$$

unserem Fall erhält man ein System von unendlich vielen linearen algebraischen Gleichungen; die Unbekannten sind nun einzelne Werte der Fourierkoeffizienten (physikalisch ausgedrückt: die Amplituden einzelner gebeugter Wellen). In den linearen Gleichungen tritt die primäre Erregung als zweites Glied (Inhomogenität) auf¹⁾. Verschwindet die primäre Erregung, so ist es *im allgemeinen* auch für die sekundäre der Fall. Die Sonderfälle (die bei algebraischen Systemen dem Verschwinden der Determinante der Koeffizienten entsprechen) bestehen aus Wellen, die allein den Maxwell'schen Gleichungen und den Grenzbedingungen genügen; sie rufen eine Unbestimmtheit hervor, werden aber von der Ausstrahlungsbedingung ausgeschlossen²⁾. Wenn das System der Gleichungen Teilsysteme enthält, die homogen sind, verschwinden die entsprechenden Unbekannten. So vereinfacht sich das Problem wesentlich; u. a. verschwinden selbstverständlich die Amplituden der gebeugten Wellen, die sich nicht parallel der x, z -Ebene fortpflanzen oder anders als die primäre Erregung polarisiert sind.

oder:

$$(b') \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\beta [\alpha(\beta) f(\alpha - \beta) + b(\beta) g(\alpha - \beta)] = 0,$$

d. h. eine lineare Integralgleichung zwischen $f(\alpha)$ und $g(\alpha)$ statt einer algebraischen Gleichung wie (a'). Ist die Entwicklung von $A(x)$ und $B(x)$ eine Fourierreihe statt eines Integrals, so entartet die Integralgleichung in ein algebraisches Gleichungssystem.

1) Physikalisch ist das selbstverständlich; mathematisch könnte man vielleicht denken, daß die Summe selbst der Fourierkoeffizienten der primären und sekundären Erregung als Unbekannte aufgenommen werden kann; dann würde die Inhomogenität verschwinden. Das ist aber unmöglich, da die Fourierintegrale der primären und sekundären Erregung mathematische Ausdrücke verschiedener Natur sind, so daß ihre Koeffizienten nicht summiert werden können.

2) Die Sonderfälle haben die Bedeutung von Eigenschwingungen des betreffenden Systems von Medien und Grenzflächen; solche Eigenschwingungen sind unserem Problem fremd und müssen aus physikalischen Gründen ausfallen. Das geschieht bekanntlich durch die Ausstrahlungsbedingung, die mathematisch dafür hergestellt wird. Im Falle von ebenen Grenzflächen bedeutet der Sonderfall Existenz einer Eigenschwingung, die aus einer *einzigen* Fourierkomponente in jedem Medium besteht. Das entspricht bei durchsichtigen Medien dem Fall der Brewsterschen Brechung, bei unterm metallischen Medium den ebenen Oberflächenwellen (vgl. z. B.: A. Sommerfeld, bei Frank-Mises: Die Differentialgleichungen der Math. Phys., 2. Aufl., 1935, II B., S. 876 ff.). Die Sonderfälle selbst sind durch die Ausstrahlungsbedingung verboten; es kann aber Wellen geben, die den Eigenschwingungen ähnlich und mit der Ausstrahlungsbedingung verträglich sind: dann ist die Determinante des Gleichungssystems von Null verschieden aber sehr klein und daher sind die entsprechenden Amplituden sehr groß. Physikalisch: Eigenschwingungen bestehen ohne primäre Erregung, sind aber durch die Ausstrahlungsbedingung ausgeschlossen; „Quasi-Eigenschwingungen“, die mit der Ausstrahlungsbedingung verträglich sind, sind bei kleiner primärer Erregung sehr intensiv (vgl. darüber den Anh. II).

Mit der bisher skizzierten Methode findet man, daß nur solche gebeugte Wellen angeregt werden, deren x -Komponente der reziproken Wellenlänge (d. h. des Impulses) sich um ein Vielfaches des reziproken Gitterabstands von der entsprechenden Komponente bei der primären Welle unterscheiden¹⁾. Diese Tatsache hat Rayleigh einfach als qualitatives Resultat der elementaren Beugungstheorie angenommen und mit ihrer Hilfe hat er einen Ansatz zur direkten Lösung des Beugungsproblems hergestellt. Die Grenzbedingungen genügen genau, die freien Parameter des Ansatzes zu bestimmen; damit wird der Ansatz gerechtfertigt. Zweck der bisherigen Überlegungen war nicht nur den Rayleighschen Ansatz, der mathematisch und physikalisch schon begründet ist, besser zu rechtfertigen. Ich habe vielmehr gedacht eine allgemeinere Methode zur Lösung ähnlicher Probleme zu skizzieren, und insbesondere hoffe ich, diese Überlegungen sind nützlich um einige Ansichten der späteren Diskussion besser zu verstehen. Die betreffenden Rechnungen habe ich als nicht unbedingt nötig weggelassen; von jetzt an werde ich einfach dem Voigtschen Formalismus folgen, der der Methode der Fourierintegrale völlig äquivalent ist.

Nach den Bezeichnungen (3) der einfallenden Welle stellen wir das vollständige Vektorfeld \mathfrak{A} dar (Rayleigh-Voigtscher Ansatz!)

$$\mathfrak{A} = (0, A, 0).$$

$$(4) \quad \left\{ \begin{array}{l} z > \zeta; \quad A = A^+ = E e^{ik(a_0 x - \gamma_0 z - ct)} \\ \quad \quad \quad + \sum_{r=-\infty}^{\infty} R_r e^{ik(a_r x + \gamma_r z - ct)}; \\ z < \zeta; \quad A = A^- = \sum_{r=-\infty}^{\infty} D_r e^{ik(a_r x - \gamma_r z - ct)}, \end{array} \right.$$

1) Zusammensetzung im Fourierintegral der x -Abhängigkeit der primären Welle mit den Exponenten der Fourier-Reihenentwicklung der Funktion $\zeta(x)$!

Nach dem Schema der Fußnote 2) S. 400 sieht die Sache so aus: die Grenzbedingungen haben grundsätzlich die Form:

$$(c) \quad A(x) F(x) = u e^{i a_0 x}.$$

Hier stellt $A(x)$ die Gitterwirkung (die Periodizität besitzt), also:

$$A(x) = \sum_n a_n e^{i n p x},$$

$F(x)$ die sekundäre Erregung, also:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha) e^{i \alpha x} d\alpha$$

und $u e^{i a_0 x}$ die primäre Erregung dar. Dann ist (c) mit

$$(c') \quad \sum_n a_n f(\alpha_0 - n p) = u$$

gleichbedeutend; $f(\alpha)$ ist also erst in den Punkten $\alpha_0 - n p$ von Null verschieden.

wo:

$$\alpha_r = \alpha_0 + r l, \quad \gamma_r = \sqrt{1 - \alpha_r^2}, \quad \nu_r = \sqrt{n^2 - \alpha_r^2}, \quad l = \frac{2\pi}{k\delta}.$$

δ = Periode der Funktion $\zeta(x)$: Gitterabstand; r = ganze Zahl

\mathfrak{A} stellt je nach der Polarisation das elektrische oder das magnetische Feld dar; E ist die Amplitude der einfallenden Welle, die R_r 's und die D_r 's sind die unbekannten Amplituden der gebeugten Wellen.

Hier, wie bei Rayleigh, laufen die Summen bis zu Unendlich: Voigt hat sie dagegen mit der Annahme beschränkt, daß $\alpha_r \leq 1, \gamma_r$ also reell ist, d. h. daß im Vakuum nur ebene Wellen reeller Einfallrichtung auftreten¹⁾. Dies scheint mir aus physikalischen wie aus mathematischen Gründen nicht annehmbar zu sein. Die Wellen mit imaginärem γ sind physikalischer Existenz fähig; obwohl sie Ursprung keines reellen Beugungsbilds sind, haben sie die Bedeutung eines Energiestroms in der Nähe der Grenzfläche und können, wie wir aufzeigen werden, die Intensität der gewöhnlichen gebeugten Wellen beeinflussen. Man muß nur zugeben, daß das Auftreten dieser Wellen nach der elementaren Beugungstheorie nicht so evident ist; es folgt aber zweifellos von unserer Methode des Fourierintegrals. Die Beschränkung der Summe bedeutet mathematisch eine Beschränkung der Zahl der Unbekannten (d. h. der R_r 's und der D_r 's); wir würden also einem System unendlich vieler Gleichungen mit endlich vieler Unbekannten begegnen.

Wenn \mathfrak{A} das magnetische Feld darstellt, lauten die Grenzbedingungen für $z = \zeta$

$$(5) \quad A^+ = A^-; \quad n^2 \text{grad}_{\text{norm.}} A^+ = \text{grad}_{\text{norm.}} A^-,$$

wo $\text{grad}_{\text{norm.}}$ die zur Grenzfläche senkrechte Komponente des Gradienten bezeichnet²⁾. Wenn \mathfrak{A} das elektrische Feld darstellt, ist dagegen:

$$(6) \quad A^+ = A^-; \quad \text{grad}_{\text{norm.}} A^+ = \text{grad}_{\text{norm.}} A^-.$$

1) W. Voigt, a. a. O. S. 43.

2) Die vier Grenzbedingungen (Stetigkeit der tangentiellen Komponenten des elektrischen und des magnetischen Feldes) reduzieren sich in unserem Fall zu zwei, da die zwei Polarisationen separiert sind und die Wellen sich parallel der (x, z) -Ebene fortpflanzen. Nehmen wir nun ein Koordinatensystem (ξ, η, ζ) mit $\eta \equiv y$, und mit der (ξ, ζ) -Ebene tangentiell der Grenzfläche. Im ersten Fall ist

$$H_{\text{tang.}}^{\pm} = H_y^{\pm} = H_{\eta}^{\pm} = A^{\pm};$$

$$E_{\text{tang.}}^+ = E_{\xi}^+ = -\frac{1}{ikc} \frac{\partial E_{\xi}^+}{\partial t} = -\frac{1}{ik} \frac{\partial H_{\eta}^+}{\partial \zeta};$$

$$E_{\text{tang.}}^- = E_{\xi}^- = -\frac{1}{ikn^2} \left(\frac{s}{c} \frac{\partial E_{\xi}^-}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{c} E_{\xi}^- \right) = -\frac{1}{ik} \frac{1}{n^2} \frac{\partial H_{\eta}^-}{\partial \zeta}.$$

Analoge Beziehungen gelten für den zweiten Fall.

Die Rechnungen führen wir für den ersten Fall durch, der zweite Fall ergibt sich aus dem ersten, wenn wir in den Endresultaten $n^2 = 1$ setzen.

Die zweite (5) kann auch so umgeformt werden:

$$(7) \quad n^2 \frac{\partial A^+}{\partial z} - \frac{\partial A^-}{\partial z} = \left(n^2 \frac{\partial A^+}{\partial x} - \frac{\partial A^-}{\partial x} \right) \frac{d\zeta}{dx} \quad \text{perhaps } \frac{dx}{dz}?$$

Setzen wir die (4) in (5) und (7) ein:

$$(8) \quad \left\{ \begin{aligned} & e^{ik(a_0 x - ct)} \left[E e^{-ik\gamma_0 \zeta} + \sum_r R_r e^{ik(rlx + \gamma_r \zeta)} \right. \\ & \quad \left. - \sum_r D_r e^{ik(rlx - \gamma_r \zeta)} \right] = 0, \\ & e^{ik(a_0 x - ct)} ik \left[-n^2 \gamma_0 E e^{-ik\gamma_0 \zeta} + n^2 \sum_r \gamma_r R_r e^{ik(rlx + \gamma_r \zeta)} \right. \\ & \quad + \sum_r \gamma_r D_r e^{ik(rlx - \gamma_r \zeta)} - n^2 a_0 \frac{d\zeta}{dx} E e^{-ik\gamma_0 \zeta} \\ & \quad - n^2 \frac{d\zeta}{dx} \sum_r a_r R_r e^{ik(rlx + \gamma_r \zeta)} \\ & \quad \left. + \frac{d\zeta}{dx} \sum_r a_r D_r e^{ik(rlx - \gamma_r \zeta)} \right] = 0. \end{aligned} \right.$$

Die Faktoren aus den Klammern fallen aus. Diese Gleichungen wollen wir als Fourierreihe nach den Funktionen:

$$e^{\frac{2\pi i r x}{\delta}} = e^{ikrlx}$$

entwickeln und sämtliche Koeffizienten gleich Null setzen. Das geschieht durch Potenzentwicklung der exponentiellen Größen $e^{ik\gamma\zeta}$ und Einsetzen der Fourierschen Darstellung:

$$(9) \quad \zeta = \frac{\xi}{k} \sum_r \zeta_r e^{ikrlx},$$

wo $|\xi| < 1$ zu wählen ist; der Einfachheit halber können wir $\zeta_0 = 0$ wählen (d. h. annehmen, daß $\xi = 0$ ist).

Man erhält ein System unendlich vieler linearer Gleichungen mit den Unbekannten R_r und D_r . Die Koeffizienten sind konvergente Reihenentwicklungen nach den Potenzen von $k\xi$ d. h. vom Parameter ξ . Es ist dann auch:

$$(10) \quad R_r = R_r^{(0)} + R_r^{(1)} \xi + R_r^{(2)} \xi^2 + \dots$$

zu setzen (wo $R_r^{(n)}$ von ξ unabhängig ist) und (7) endlich so zu schreiben:

$$\begin{aligned}
 & E + \sum_r (R_r^{(0)} - D_r^{(0)}) e^{ikr lx} + \xi \sum_r (R_r^{(1)} - D_r^{(1)}) e^{ikr lx} \\
 & - i \xi \sum_r \zeta_r e^{ikr lx} \left[\gamma_0 E - \sum_s (\gamma_s R_s^{(0)} + \nu_s D_s^{(0)}) e^{iks lx} \right] \\
 & - \frac{1}{2} \xi^2 \sum_r \sum_s \zeta_r \zeta_s e^{ik(r+s) lx} \left[\gamma_0^2 E + \sum_t (\gamma_t^2 R_t^{(0)} - \nu_t^2 D_t^{(0)}) e^{ikt lx} \right] \\
 & + \xi^2 \sum_r (R_r^{(2)} - D_r^{(2)}) e^{ikr lx} \\
 & + i \xi^2 \sum_r \zeta_r e^{ikr lx} \sum_s (\gamma_s R_s^{(1)} + \nu_s D_s^{(1)}) e^{iks lx} \\
 & + \xi^3 (\dots) + \dots = 0, \\
 & - n^2 \gamma_0 E + \sum_r (n^2 \gamma_r R_r^{(0)} + \nu_r D_r^{(0)}) e^{ikr lx} \\
 & + \xi \sum_r (n^2 \gamma_r R_r^{(1)} + \nu_r D_r^{(1)}) e^{ikr lx} \\
 & + i \xi \sum_r \zeta_r e^{ikr lx} \left[n^2 \gamma_0^2 E + \sum_s (n^2 \gamma_s^2 R_s^{(0)} - \nu_s^2 D_s^{(0)}) e^{iks lx} \right] \\
 & - i \xi l \sum_r r \zeta_r e^{ikr lx} \left[n^2 \alpha_0 E + \sum_s \alpha_s (n^2 R_s^{(0)} - D_s^{(0)}) e^{iks lx} \right] \\
 & + \xi^2 \sum_r (n^2 \gamma_r R_r^{(2)} + \nu_r D_r^{(2)}) e^{ikr lx} \\
 & + i \xi^2 \sum_r \zeta_r e^{ikr lx} \sum_s (n^2 \gamma_s^2 R_s^{(1)} - \nu_s^2 D_s^{(1)}) e^{iks lx} \\
 & - i \xi^2 l \sum_r r \zeta_r e^{ikr lx} \sum_s \alpha_s (n^2 R_s^{(1)} - D_s^{(1)}) e^{iks lx} \\
 & + \frac{1}{2} \xi^2 \sum_r \sum_s \zeta_r \zeta_s e^{ik(r+s) lx} \\
 & \quad \cdot \left[n^2 \gamma_0^3 E - \sum_t (n^2 \gamma_t^3 R_t^{(0)} + \nu_t^3 D_t^{(0)}) e^{ikt lx} \right] \\
 & - \xi^2 l \sum_r \sum_s r \zeta_r \zeta_s e^{ik(r+s) lx} \\
 & \quad \cdot \left[n^2 \gamma_0 \alpha_0 E - \sum_t \alpha_t (n^2 \gamma_t R_t^{(0)} + \nu_t D_t^{(0)}) e^{ikt lx} \right] \\
 & + \xi^3 (\dots) + \dots = 0.
 \end{aligned}
 \tag{11}$$

Da die (11) für beliebige ξ und x gelten müssen, müssen die einzelnen Koeffizienten von $\xi^h e^{ikr|x}$ verschwinden. So erhält man:

$$(12) \left\{ \begin{aligned} R_0^{(0)} &= \frac{n^2 \gamma_0 - \nu_0}{n^2 \gamma_0 + \nu_0} E; \quad D_0^{(0)} = \frac{2n^2 \gamma_0}{n^2 \gamma_0 + \nu_0} E; \quad R_r^{(0)} = D_r^{(0)} = 0 \text{ für } r \neq 0; \\ R_0^{(1)} &= D_0^{(1)} = 0; \\ R_r^{(1)} &= i \zeta_r E (n^2 - 1) 2\gamma_0 \frac{n^2 \alpha_0 \alpha_r - \nu_0 \nu_r}{(n^2 \gamma_0 + \nu_0)(n^2 \gamma_r + \nu_r)}; \\ D_r^{(1)} &= i \zeta_r E (n^2 - 1) 2\gamma_0 n^2 \frac{\gamma_r \nu_0 + \alpha_r \alpha_0}{(n^2 \gamma_0 + \nu_0)(n^2 \gamma_r + \nu_r)}; \\ R_r^{(2)} &= \frac{\gamma_0 (n^2 - 1) E}{(n^2 \gamma_0 + \nu_0)(n^2 \gamma_r + \nu_r)} \left[n^2 (\nu_0 - \nu_r) \sum_s \zeta_s \zeta_{r-s} \right. \\ &\quad + 2 \sum_s \frac{\zeta_s \zeta_{r-s}}{(n^2 \gamma_s + \nu_s)} \{ (n^2 - n^2 \alpha_r \alpha_s + \gamma_r \nu_r) (n^2 \alpha_0 \alpha_s - \nu_0 \nu_s) \\ &\quad \left. - n^2 (n^2 - \alpha_r \alpha_s - \nu_r \nu_s) (\alpha_0 \alpha_s + \nu_0 \gamma_s) \} \right]; \\ D_r^{(2)} &= \frac{n^2 \gamma_0 (n^2 - 1) E}{(n^2 \gamma_0 + \nu_0)(n^2 \gamma_r + \nu_r)} \left[(n^2 \gamma_r + \nu_0) \sum_s \zeta_s \zeta_{r-s} \right. \\ &\quad + 2 \sum_s \frac{\zeta_s \zeta_{r-s}}{(n^2 \gamma_s + \nu_s)} \{ 1 - \alpha_r \alpha_s - \gamma_r \gamma_s \} (n^2 \alpha_0 \alpha_s - \nu_0 \nu_s) \\ &\quad \left. - (n^2 - \alpha_r \alpha_s + n^2 \gamma_r \nu_r) (\alpha_0 \alpha_s + \nu_0 \gamma_s) \right]; \\ &\text{usw.} \end{aligned} \right.$$

Für die Gültigkeit der ganzen Methode muß eine solche endliche Zahl K existieren, daß:

$$(13) \quad K > |R_r^{(h)}|$$

für jedes r und h ist. [Bedingung für die Konvergenz der Reihe (10).]

Davon abgesehen sind diese Resultate, ebenso wie die ganze bisherige Ausführung, ohne Näherungsmethoden erhalten worden. Für praktische Zwecke ist es aber unmöglich, die unendlich vielen Unbekannten zu berechnen; die Komplikation der Ausdrücke von $R_r^{(h)}$ wächst vielmehr mit h schnell. Da wir die Rechnung nur bis $h=2$ durchgeführt haben, müssen wir, um $R_r^{(3)} \xi^3$ vernachlässigen zu können, annehmen, daß auch die ζ 's kleiner als 1 sind. Diese Annahme trifft in den praktischen Fällen nicht so gut zu: bei gelbem Licht von 6000 Å ist nämlich:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} > 10^5 \text{ cm}^{-1}.$$

Die Gitterabstände sind andererseits der Größenordnung 10^{-4} cm; damit $\zeta_r < 1$ ist, sollen also die Streifen nicht tief und auch schmal

sein, um die Tiefe „zwischen vielen ζ_r 's zu verteilen“. Jedenfalls ist bisher keine andere Näherungsmethode bekannt. Deswegen werden wir annehmen, daß $\xi^2 \zeta_r \zeta_i \ll 1$ und $\xi^3 \zeta_r \zeta_i \sim 0$ ist, und die Folgen der Resultate (12) diskutieren.

Wie es zu erwarten war, verschwinden die Amplituden aller gebeugten Wellen für $\xi = 0$, da diese Näherung dem Falle $\zeta = 0$ (glatte Grenzfläche, kein Gitter!) entspricht¹⁾. Die Ausdrücke für $R_0^{(0)}$ und $D_0^{(0)}$ sind den Fresnelschen Formeln identisch.

Wenn wir $n^2 \gg 1$ setzen, vereinfachen sich die (12) und gehen in die Voigtschen Formeln über; jedoch mit dem bekannten Unterschied in der Bedeutung der Summationszeichen. Da hier die Summen von $-\infty$ bis ∞ laufen, so kann jede Fourierkomponente des Gitterprofils, falls sie groß genug ist, in Gegensatz zur Voigtschen Behauptung (vgl. bes. a. a. O. S. 53), die ersten Spektren in zweiter Näherung beeinflussen.

Wenn wir nun $n^2 \rightarrow \infty$ streben lassen, — unendliche Leitfähigkeit, vollkommenes Reflexionsvermögen! — erhält man die Rayleighschen Formeln, die viel einfacher sind. In der zweiten Summe in den Ausdrücken von $R_r^{(2)}$ und $D_r^{(2)}$ reduzieren sich die Nenner zu γ_r ; bei günstigen Werten von α_0 und l (d. h. von der Wellenlänge), so daß das eine der γ_r 's verschwindet (Rayleighsche Bedingung!) divergieren alle $R_r^{(2)}$'s und $D_r^{(2)}$'s zusammen mit $R_r^{(1)}$. Das gilt natürlich nur, wenn \mathfrak{A} das magnetische Feld bezeichnet; für die entgegengesetzte Polarisierung gibt es scheinbar keine Anomalie, die mit den Rayleighschen Bedingungen verbunden ist. Das war, wie schon erwähnt, ein wesentliches Resultat der ersten Untersuchung Rayleighs²⁾.

1) Obwohl, wenn (13) befriedigt ist, unser Verfahren exakt ist, soll es eigentlich als Methode von sukzessiven Näherungen bezeichnet werden, wie es aus der folgenden elementaren physikalischen Darstellung herauskommt. In nullter Näherung wird die Grenzfläche als eben betrachtet; das Problem reduziert sich also auf gewöhnlicher Reflexion und Brechung. In erster Näherung kommt die Wirkung des Gitters nur dadurch zustande, daß das Spektrum der primären Erregung nicht als einzige scharfe Linie auftritt (einfallende ebene Welle), sondern, daß es eine Reihe Linien enthält, die aus der Kombination mit der Gitterperiode entstehen (vgl. Fußnote 1), S. 402). Auch in zweiter Näherung behandelt man das System noch immer als ebene Grenzfläche: jetzt sind jedoch die gebeugten Wellen, die in erster Näherung in der sekundären Erregung erscheinen, mit ihrem Kombinationsspektrum in der primären Erregung enthalten usw.

2) In der Ableitung der Resultate (12) wurde die Beziehung $\nu_r^2 = n^2 - \alpha_r^2$ benutzt; für die andere Polarisierung können also die Resultate nicht einfach durch Einsetzen von $n^2 = 1$ in (12) erhalten werden. Dagegen ist:

Rayleigh hatte schon bemerkt, daß die Divergenz der Amplitude nichts anderes bedeutet, als daß unsere Methode ungeeignet ist¹⁾. Darauf könnte man vielleicht einwenden, daß der Fall des vollkommenen Reflexionsvermögens physikalisch unrealisierbar ist, und deswegen keine endliche Lösung zu haben braucht. Die mathematische Aufgabe ist andererseits auch für $n^2 = \infty$ vollständig bestimmt; es soll also eine Lösung der Form (4) für $z \geq \zeta$ geben, auch wenn $n^2 = \infty$ und das eine $\gamma_s = 0$ ist. Keine der Amplituden R_r darf unendlich werden, und die ganze einfallende Energie soll in den gebeugten Wellen mit reellen γ_r enthalten sein. Es ist nämlich undenkbar, daß — wenn keine Absorption stattfindet — die einfallende Energie sich auf die Oberfläche konzentriert, ohne wieder gestreut zu werden²⁾.

Um konsequent weiter zu gehen, sollten wir nun unsere Formeln nachprüfen, d. h. experimentelle Werte für die Funktion $\zeta(x)$, für Wellenlänge, Einfallswinkel und Brechungsindex einsetzen, die Intensität der gebeugten Wellen berechnen und dieselbe mit der Erfahrung vergleichen. Die Komplikation der Formeln rät aber, darauf zu verzichten; weiter sind die Funktionen $\zeta(x)$ praktisch unbekannt. Unsere Resultate werden wir daher nur benutzen, um die Erfahrung qualitativ zu diskutieren.

4. Woods optische Anomalien: Diskussion

Die Erscheinungen, besonders diejenigen des Gitters C , wurden schon im Abschn. 2 dargestellt; wir werden sie nun diskutieren.

Die Unendlichkeitsstelle, die in den Rayleighschen Formeln vorhanden war, tritt in der verfeinerten Theorie bei unvollkommen

$$(12') \quad \begin{cases} R_0^{(0)} = \frac{\gamma_0 - \nu_0}{\gamma_0 + \nu_0} E, & D_0^{(0)} = \frac{2\gamma_0}{\gamma_0 + \nu_0} E, & R_r^{(0)} = D_r^{(0)} = 0 \text{ für } r \neq 0, \\ R_0^{(1)} = D_0^{(1)} = 0, & R_r^{(1)} = D_r^{(1)} = i \zeta_r E 2\gamma_0 \frac{\gamma_0 - \nu_0}{\gamma_r + \nu_r}, \\ R_r^{(2)} = - \frac{\gamma_0 (\gamma_0 - \nu_0)}{\gamma_r + \nu_r} E \left[(\nu_0 + \nu_r) \sum_s \zeta_s \zeta_{r-s} + 2 \sum_s \zeta_s \zeta_{r-s} (\gamma_s - \nu_s) \right], \\ D_r^{(2)} = - \frac{\gamma_0 (\gamma_0 - \nu_0)}{\gamma_r + \nu_r} E \left[(\nu_0 - \gamma_r) \sum_s \zeta_s \zeta_{r-s} + 2 \sum_s \zeta_s \zeta_{r-s} (\gamma_s - \nu_s) \right]. \end{cases}$$

1) Wenn der eine von den Koeffizienten $R_r^{(h)}$ unendlich groß wird, ist die Bedingung (13) nicht mehr befriedigt, so daß die Reihenentwicklung (10) und die daraus folgende Berechnung nicht mehr gerechtfertigt ist.

2) Dieser Gedankengang wird bei einer anderen Gelegenheit im Abschn. 5, S. 423, entwickelt werden.

reflektierenden Gittern nicht mehr auf. Wir haben es eben gesehen; die Rayleighschen Nenner γ_r lauten nämlich in den Summationsgliedern von $R_r^{(2)}$ und $D_r^{(2)}: \gamma_r + \frac{\nu_r}{n^2}$ [Formel (12)]. Was bleibt nun vom Rayleighschen Resultat als Anomalie übrig?

Die Wirkung der Rayleighschen Bedingung auf $R_r^{(2)}$ kommt in (12) dadurch zustande, daß ein Glied von $R_r^{(2)}$ zu $R_r^{(1)}$ proportionell ist; betrachten wir also das s te Spektrum in der Nähe des tangentiellen Austritts. Die spektrale Dispersion ist in diesem Gebiet bekanntlich sehr groß¹⁾. Wir stellen uns leicht vor, daß die Intensität eines Spektrums langsam mit dem Austrittswinkel variiert; die Intensitätsänderung des s ten Spektrums über einen großen Winkel bezieht sich aber auf einen kleinen Bereich der Wellenlänge und reagiert also auf einen sehr kleinen Winkelbereich des r ten Spektrums²⁾. Mathematisch: R_r ist eine Funktion von γ_r ³⁾, so wird die Ableitung $\frac{dR_r}{d\lambda}$ ein Glied $\frac{\partial R_r}{\partial \gamma_r} \frac{d\gamma_r}{d\lambda}$ enthalten, das bei Rayleighschen Bedingungen unendlich groß wird⁴⁾. Dieses Resultat scheint ganz allgemein zu sein und trifft wahrscheinlich bei jedem Fall Rayleighscher Bedingungen zu. Das bedeutet aber nur, daß die Rayleighschen Bedingungen immer eine anomale Stelle im Verlauf der Intensität hervorrufen, die Tragweite der Anomalie bleibt aber fraglich. Wenn der Beitrag des $R_r^{(1)}$ enthaltenden Gliedes zur $R_r^{(2)}$ oder von $R_r^{(2)}$ zu R_r klein ist, wird diese Tragweite unbedeutend sein. Soll das nicht stattfinden, so muß die zweite Näherung — d. h. $R_r^{(2)} \xi^2$ — in bezug zur ersten sehr wichtig sein; weiter enthält das anomale Glied das Produkt $\xi_s \xi_r - s$: es wird also günstig sein, daß die höheren⁵⁾ Fourierkoeffizienten der Entwicklung von $\xi(x)$ größer als die ersten sind. Von diesem Standpunkt kann man einige experimentelle Eigenschaften der Anomalien leicht verstehen. Um große Werte der höheren Fourierkoeffizienten zu erhalten, muß das Gitter scharfe Kämme oder schmale Rinnen enthalten. Kämme können als Grenzen zwischen sehr breiten Streifen vorkommen; man

1) Der Austrittswinkel hängt von der Wellenlänge wie ein Arcsinus ab: wenn der Winkel zu $\pi/2$ strebt, strebt die Ableitung des Arcsinus zu Unendlich.

2) Eine derartige Überlegung ist schon bei Wood zu finden.

3) Das ist wahrscheinlich von der benutzten Näherungsmethode unabhängig.

4) $\gamma_r = \sqrt{1 - (\alpha + s l)^2}$; $\frac{d\gamma_r}{d l} = - \frac{s(\alpha + s l)}{\gamma_r}$; die R.B. bedeutet, daß $\alpha_s = 1$, also $\gamma_r = 0$ ist.

5) s ist die Ordnung des tangentiell austretenden Spektrums, also allgemein größer als r .

versteht, wie sie beim Abbürsten zerstört werden können und die Anomalien folglich verschwinden. Wenn aber die Streifen wie schmale Rinnen aussehen, können sie durch Abbürsten nicht beeinflußt werden. Die Grenzen der Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment sind in diesem Gebiet von der Unmöglichkeit gezogen, weder die Funktion $\zeta(x)$ eines Gitters zu kennen, noch ein Gitter mit vorgegebenem Profil zu bauen.

Was nun besonders das Gitter C betrifft, ist es klar, daß, wenn das Glied mit $R_r^{(1)}$ im Ausdruck für $R_r^{(1)}\xi + R_r^{(2)}\xi^2$ bedeutend ist, die R.B. eine merkliche Unstetigkeit der Intensität (als Funktion der Wellenlänge) — d. h. eine *scharfe Kante* — erzeugt; das Vorzeichen des Sprunges bleibt unbestimmt.

Was bleibt nun übrig bei endlicher Leitfähigkeit von der Unendlichkeitsstelle der Funktion selbst $R_r^{(2)}$ (und nicht nur ihrer Ableitung), die nur mit einer Polarisierung auftrat? Das kann man versuchsweise durch das mathematische Studium der Formeln (12) erreichen; ich möchte aber vorher die physikalische Ansicht des Problems diskutieren. Aus diesen Überlegungen sollten wir noch die Vervollständigung der Erklärung der *scharfen Kante* erwarten. Die Anwesenheit einer Unendlichkeitsstelle in der Ableitung R_r weist nämlich nur auf die Möglichkeit einer Anomalie und auf ihre Art hin; es wurde aber schon bemerkt, daß andere Bedingungen (d. h. große Werte gewisser Koeffizienten) nötig sind, damit die Anomalie merklich ist.

Bei dem Gitter C ist es wesentlich, daß die Anomalien sich sehr weit von der Rayleighschen Wellenlänge in Richtung Rot erstrecken, und daß sie von ihrer spektralen Lage und von der Natur der Oberfläche sehr beeinflußt werden. Als Ausgangspunkt nehmen wir folgende drei Bemerkungen: 1. Eine Idee von Langer, über die Wood berichtet: da die Lage der Anomalien von der Natur der Grenzfläche beeinflußt wird, so hängt wahrscheinlich die Erscheinung zusammen „with that part of the diffracted waves which travel with different velocity along the surface of the grating“. 2. In den Anwendungen der Rayleighschen Überlegungen haben wir bisher angenommen, daß die von einem Streifen gebeugte Welle mit der Geschwindigkeit c fortschreitet, um den benachbarten Streifen zu erreichen (und daß dasselbe für die tangentiell auslaufende Welle gilt). Sollten sich nun die tangentiellen Wellen langsamer fortpflanzen, so würde das Auftreten der mit den R.B. gebundenen Anomalien sich nach Rot verschieben¹⁾. 3. Wenn wir

1) Das gilt aber nicht für die allgemeine Singularität, die von der unendlich großen spektralen Dispersion hervorgerufen wird.

die Beugung naiv nach dem Huyghensschen Prinzip behandeln, müssen wir uns daran erinnern, daß die von einem Punkt einer metallischen Oberfläche ausgestrahlte Welle keine einfache Kugelwelle ist, sondern daß sie sich entlang der Oberfläche wie eine Sommerfeldsche Oberflächenwelle verhält¹⁾. Diese Oberflächenwellen sind bei optischen Frequenzen sehr wenig gedämpft; die von vielen (~ 100) Streifen gestreuten Wellen können sich also auf einen weiteren Streifen überlagern. Diese Wellen sind eben mit ihrem magnetischen Feld parallel zur Grenzfläche polarisiert, und haben bei optischen Frequenzen kleinere Phasengeschwindigkeit als c .

Gemäß diesen Bemerkungen scheint es, daß die hellen Banden des Gitters C durch eine korrekte Anwendung des Huyghensschen Prinzips erklärt werden können. Man kann nämlich die Überlegung von S. 396 u. 397 über die physikalische Bedeutung der R.B. mit der Annahme wiederholen, daß die Streifen A entlang der Oberfläche Sommerfeldsche Wellen aussenden. In der Bestimmung der Resonanz (d. h. der R.B.) in B muß man also in Betracht ziehen, daß die Strecke AB mit anderer Wellenlänge als OB durchlaufen wird (vgl. Abb. 2). Wegen der (kleinen) Dämpfung ist nur eine (große) beschränkte Zahl von Streifen A für die Resonanz in B wirksam. Wir hätten so den Vorteil, daß die Resonanz keine vollkommene, sondern eine gedämpfte und verbreiterte Resonanz wäre, was eben in Einklang mit dem Experiment ist.

Andererseits ist die im Abschn. 3 entwickelte Theorie formell geschlossen, und man sieht zunächst nicht, was die Sommerfeldschen Wellen mit ihr zu tun haben. Dafür wollen wir die Sommerfeldsche Berechnung der Ausstrahlung eines auf einer leitenden Oberfläche senkrechtstehenden Oszillators von einem etwas besonderen Gesichtspunkt erläutern. Das geschieht durch die im Abschn. 3 entwickelte Methode, in der primäre und sekundäre Erregung als Fourierintegrale dargestellt werden. Um den Oszillator haben wir Zylindersymmetrie; von den Zylinderkoordinaten r, φ, z steht r als unser x , φ kommt wie y gar nicht vor; die Abhängigkeit der Grundlösungen von r wird nicht durch exponentielle, sondern durch Zylinderfunktionen dargestellt. Diese Unterschiede sind jedoch unwesentlich; wesentlich ist es, daß die Grenzbedingungen gleich sind. Ein Unterschied besteht aber darin, daß das Spektrum der primären Erregung auf dem Gitter, auch einschließlich der Wirkung der Streifen, diskret²⁾, im Falle des Oszillators dagegen kontinuierlich ist. So besitzt auch die sekundäre Erregung, die leicht ermittelt wird,

1) A. Sommerfeld, a. a. O. (Fußnote 2, S. 401), besonders S. 919 ff.

2) Vgl. Fußnote 1) S. 407.

eine kontinuierliche spektrale Zusammensetzung (Fourierintegral). Um die Zusammensetzung besser zu beherrschen, wird bei Sommerfeld der Integrationsweg des Fourierintegrals in der komplexen Ebene des Parameters — den wir nach den Bezeichnungen des Abschn. 3 α nennen — umgeformt. Man erhält so die Summe der Schleifenwege um zwei Verzweigungspunkte und des Cauchyschen Integralwegs um einen Pol des Fourierkoeffizienten. Der Beitrag der Schleifenwege wird Raumwelle genannt, und interessiert uns hier nicht weiter. Der Pol kommt durch eine Nullstelle der Determinante des linearen Gleichungssystems zustande [vgl. S. 401 und ebenda Fußnote 2)], welche hier durch die Ausstrahlungsbedingung nicht verboten ist¹⁾. Das Cauchysche Residuum des Pols ist von einer einzigen Grundlösung dargestellt, die als oberflächliche gedämpfte Welle — Sommerfeldsche Welle — auftritt. Mathematisch bedeutet die Dämpfung, daß der Pol nicht auf der reellen Achse von α (d. h. von der reziproken Wellenlänge) liegt; ihre Kleinheit²⁾ bedeutet aber, daß er sehr nahe dieser Achse liegt. Die Determinante des Gleichungssystems, die im Nenner des Fourierkoeffizienten steht, muß also auf der reellen Achse ein Minimum mit sehr kleinen Werten besitzen.

Nach dieser Bemerkung kann man die Entstehung der Oberflächenwellen auch ohne Umformung des Integrationswegs verstehen. Der Absolutwert des Fourierkoeffizienten besitzt ein ausgeprägtes Maximum auf der reellen Achse von α ; dementsprechend ist im Wellenkomplex des Fourierintegrals ein Teilkomplex besonders merklich. Dieser Teilkomplex wird durch Interferenz seiner Elemente gedämpft: je näher der reellen Achse der Pol liegt, desto schärfer wird das Maximum und homogener — d. h. weniger gedämpft — der Teilkomplex sein (vgl. Abb. 5). Bei optischen Wellen und großer Leitfähigkeit des unteren Mediums ist in der Nähe des Pols $\operatorname{Re}(\alpha) > 1$: daher sind die einzelnen Wellen des Teilkomplexes nach oben gedämpft, d. h. oberflächlich.

Die Existenz der Sommerfeldschen Wellen ist also durch ein scharfes Maximum des absoluten Betrags der Determinante des Systems linearer Gleichungen auf der reellen Achse des Parameters bedingt. Andererseits ruft die Identität der Form der Grenzbedingungen im Sommerfeldschen und im Gitterproblem Identität der Determinanten hervor; das trifft tatsächlich zu: der singuläre Nenner

1) Die Zylinderwellen, die wir als Grundlösungen angenommen haben, haben eine singuläre Linie an der Achse der Zylinderkoordinaten: eine einzelne Grundlösung hat also in sich eigentlich keine physikalische Bedeutung.

2) Die Dämpfung ist nur bei optischen Frequenzen sehr klein.

Sommerfelds ist mit anderen Bezeichnungen mit den Ausdrücken $n^2\gamma + \nu$ identisch¹⁾. Die Fourierkoeffizienten der sekundären Erregung sind denjenigen der primären Erregung proportional, und umgekehrt proportional der Determinante. Bei der Ausstrahlung des Oszillators ist das Spektrum der primären Erregung ein Kontinuum und daher das Spektrum der sekundären Erregung ein Kontinuum mit scharfem

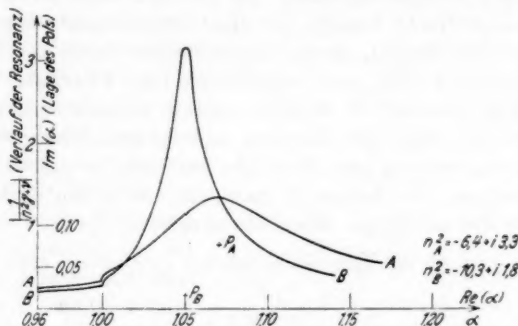


Abb. 5. Verlauf der Funktion $\left| \frac{1}{n^2\gamma + \nu} \right|$ auf der reellen Achse des Parameters α ; dementsprechend ist die Lage ihres Pols in der komplexen Ebene α dargestellt. (Man bemerke die „Kante“ bei $\alpha = 1$: Rayleighsche Bedingung)

Maximum, wo die Determinante sehr klein ist. Bei den Gittern zeigt die primäre Erregung — durch die Wirkung des Gitters [vgl. Fußnote 1) S. 407] — ein diskretes Spektrum; fällt eine Linie dieses Spektrums in das Gebiet, wo die Determinante klein ist, so wird der entsprechende Fourierkoeffizient der sekundären Erregung außerordentlich groß.

Betreffend den Ausdruck (12) für $R_s^{(1)}$ sagen wir also — und dasselbe gilt *mutatis mutandis* für $R_s^{(2)}$, das ein zu $R_s^{(1)}$ proportionales Glied enthält —: es seien Einfall und Wellenlänge so gewählt, daß $\alpha_s = \pm 1$ also $\gamma_s = 0$ ist und lassen wir dann die Wellenlänge zunehmen; der Betrag des Faktors $\frac{1}{n^2\gamma_s + \nu_s}$ wird ein scharfes Maximum aufweisen. Dieser Faktor hat natürlich schon für $\gamma_s = 0$ abnorm große Werte, obwohl das Maximum bei größeren Wellenlängen liegt. So versteht man auch, daß die scharfe Kante bei Rayleighscher Wellenlänge (d. h. bei $\gamma_s = 0$) zugleich mit den anderen Anomalien merklich wird; ein und derselbe Faktor in $R_s^{(1)}$

1) Diese Identität ist schon bei Sommerfeld zu finden [a. a. O. bes. S. 926].

besitzt nämlich unendlich große Ableitung bei $\gamma_s = 0$ und — für günstige Werte von n^2 — ein scharfes Maximum in der Nähe, das Anomalien erzeugt und zugleich den Wert bei $\gamma_s = 0$ vergrößert.

Die bisherigen Überlegungen haben uns dazu geführt, einige Eigenschaften der Formeln des Abschn. 3 (insbesondere des Faktors $\frac{1}{n^2\gamma_s + \nu_s}$) vor auszusehen und zu verstehen. Es sei aber noch daran erinnert, daß die Maxwellsche Theorie der elektromagnetischen Vorgänge in den materiellen Medien, deren Eigenschaften durch die komplexe Größe n^2 definiert sind, ganz selbständig ist. Physikalische Überlegungen und anschauliche Modelle können nützlich sein, sind aber nicht unbedingt nötig. Der Wunsch, eine anschaulichere wenn auch grobere Rechtfertigung der Resultate vor sich zu haben, ist eine Geschmacksfrage. Im Anhang II habe ich eine grobe modellmäßige Darstellung der erhaltenen Resultate skizziert.

Wenn nun n^2 ins Unendliche wächst (wollen wir eher $\frac{1}{\gamma_s + \frac{\nu_s}{n^2}}$ als $\frac{1}{n^2\gamma_s + \nu_s}$ betrachten), kommt der Pol der reellen Achse immer näher und strebt gleichzeitig nach dem Punkt $\alpha_s = 1$: bei dieser Grenze fallen wir zum Rayleighschen Fall zurück. Es war leicht zu denken, daß die Folgen der Rayleighschen Unendlichkeitsstelle, die mit der verbesserten Theorie verschwunden war, irgendwie im Gebiete der Rayleighschen Wellenlänge noch merklich sein sollten. Eigenartig ist es, daß in den praktisch vorkommenden Fällen der Pol immer vorhanden ist, und bei abnehmendem n^2 noch sehr nahe der reellen Achse bleibt, so daß die Anomalien eher verschoben werden als verschwinden.

Als praktisches Beispiel der Anomalien habe ich den Verlauf der Funktion $\frac{1}{n^2\gamma + \nu}$ im kritischen Gebiet berechnet. Für n^2 wurde ein (konstanter) experimenteller Wert, derjenige des Kupfers, bei 5890 Å, eingesetzt; ν wurde als praktisch konstant betrachtet. Die Resultate sind in der Abb. 6 eingetragen. Es ist interessant, den regulären Verlauf der Funktion außerhalb des anomalen Gebiets mit dem anomalen Verlauf zu vergleichen (vgl. auch die Abb. 5). Die rasche Änderung des Bildpunkts in der komplexen Ebene bewirkt, daß die Summe des anomalen und der regulären Glieder auch rasch von sehr kleinen zu sehr großen absoluten Werten übergehen kann. Bei Silber wäre die Anomalie noch viel stärker, Kupfer wurde aber hier gewählt, um die Resultate in eine Abbildung eintragen zu können. Vollständige numerische Berechnungen der

Formeln (12) lohnen sich dagegen nicht, da sie zu empfindlich sind gegen die Änderungen der Koeffizienten ζ_r 's, die die Erfahrung nicht zur Verfügung stellt. Es ist möglich, mit willkürlich gewählten ζ_r 's verschiedene Arten Anomalien zu erzeugen. Um die Anomalien des Gitters C zu verstehen soll man annehmen, daß die Summe der langsam veränderlichen Glieder etwa entgegengesetzt gleich ist dem Wert des anomalen Glieds für etwas größere Wellenlänge als die Rayleighsche. Die Intensität ist bekanntlich durch das Quadrat des Betrags von R_r gegeben, also von der Richtung in der komplexen Ebene unabhängig. Der Intensitätsverlauf wird nochmals im Rahmen einer allgemeineren Diskussion über die Resonanzerscheinungen im Anhang III diskutiert.

Die Wirkung der dünnen Metallschichten auf der Oberfläche des Gitters C wäre weiter zu untersuchen. In interessanten Versuchen hat Strong¹⁾ progressive Änderung der Banden — bis zu ihrer Umkehrung — infolge der progressiven Dicke der Schichten beobachtet. Das erste Problem ist, die Nullstellen der Determinante des Gleichungssystems für ein System von drei Medien zu ermitteln. Dieses Problem ist sehr leicht aufzustellen, aber ich habe es nicht lösen können²⁾.

Wegen des Erhaltungssatzes muß die Summe der auslaufenden Intensitäten aller reflektierten, gebrochenen und gebeugten Wellen gleich der einfallenden Intensität der primären Welle sein. Ist also eine gewisse gebeugte Welle bei einer gewissen Frequenz besonders

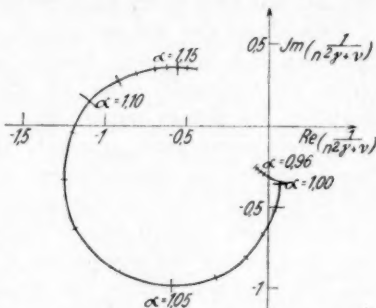


Abb. 6. Verlauf der komplexen Funktion $\frac{1}{n^2 \gamma + \nu}$ in parametrischer Darstellung bezüglich der reellen Verhältnisse α

1) Aus einer freundlichen brieflichen Mitteilung.

2) Es seien a , b und c die drei Medien mit ebenen parallelen Grenzflächen und δ die Dicke des Mediums b . Es sei wieder α der Parameter, folglich $k\alpha$ die oberflächliche Komponente der reziproken Wellenlänge und $\gamma_a = \sqrt{n_a^2 - \alpha^2}$ für das Medium a usw. Die Gleichung der Nullstellen der Determinante ist:

$$(n_b^2 \gamma_a + n_a^2 \gamma_b)(n_b^2 \gamma_c + n_c^2 \gamma_b) e^{ik\gamma_b \delta} - (n_b^2 \gamma_a - n_a^2 \gamma_b)(n_b^2 \gamma_c - n_c^2 \gamma_b) e^{-ik\gamma_b \delta} = 0.$$

Das nächste Ziel wäre, den Verlauf der Lösung α als Funktion von δ zu beherrschen.

intensiv (helle Bande), so müssen dementsprechend die anderen Wellen weniger intensiv sein (negatives Bild). Aus der im Abschn. 3 benutzten Näherungsmethode folgt es unmittelbar, daß das negative Bild ausschließlich in den regelmäßig reflektierten und gebrochenen Wellen zu finden ist, was eben in Einklang mit den Woodschen Versuchen ist¹⁾.

Schließlich: eine Näherungsmethode liegt vor, um die komplexen Amplituden der gebeugten Wellen als Potenzreihe der Tiefe der Streifen zu berechnen. Das ist durch die immerhin bedeutende Absorption des Metalls ermöglicht. Das Studium des Gitters *C* hat uns darauf aufmerksam gemacht, zwei physikalisch verschiedene Arten Anomalien zu unterscheiden: a) das Auftreten der Rayleighschen Bedingung ruft durch das unendlich große Separationsvermögen für tangentiellen Austritt eine — große oder kleine — Unstetigkeit in einem Glied zweiter Ordnung hervor; b) nur bei einer der Polarisierungen treten bei optischen Wellen und Metallgittern außerordentlich große und rasch veränderliche Werte desselben Glieds auf. Es kommt nur auf raffinierte Charaktere des — experimentell unbekannten — Profils des Gitters an, welche und wie große Effekte in der Intensität der gebeugten Wellen das anomale Glied hervorrufen kann. Die Lage der Anomalien der Art b) bezüglich der Rayleighschen Wellenlänge hängt von den optischen Konstanten der Metallfläche ab; da letztere von der Wellenlänge stark abhängen, sind auch die beobachteten Erscheinungen leicht zu verstehen.

Wir hatten schon früher (vgl. S. 397) darauf hingewiesen, daß bei R.B. eine komplizierte (mehrfache) Beugung auftritt; einfache mathematische Näherungsmethoden können daher versagen. Bei vollkommenen Reflexionsgittern sind unsere Näherungsmethoden tatsächlich ungeeignet, und man sollte nach einer anderen Methode suchen. Bei unvollkommenen Reflexionsgittern mit schmalen Streifen scheint es nun, daß unsere Methode zutrifft und daß wir mit ihrer Hilfe wenigstens einige Züge der Erscheinungen darstellen können. Wir dürfen aber nicht vergessen, daß dies vielleicht ein glücklicher Zufall ist. In der Tat sind die Einzelheiten des Beugungsvorgangs bei R.B. ganz unanschaulich, und wir besitzen keine befriedigende Methode diesen Fall quantitativ anständig zu behandeln.

1) Wenn man nämlich die Intensitäten bis zur h -ten Potenz von ξ berechnet, treten im Ausdruck für die gebeugten Wellen die Amplituden bis zu $R_r^{(h-1)}$ und $D_r^{(h-1)}$, für die regelmäßig reflektierten und gebrochenen dagegen bis zu $R_0^{(h)}$ und $D_0^{(h)}$ auf: so daß R_0 und D_0 durch $R_0^{(h)}$ und $D_0^{(h)}$ schon Glieder mit der Rückwirkung von $R_r^{(h-1)}$ und $D_r^{(h-1)}$ enthalten. Die Einschränkung dieser Näherung wird bei einer anderen Gelegenheit im Abschn. 5 diskutiert werden (vgl. S. 428 u. 429).

5. Die Anomalien der Reflexion und Beugung von Molekularstrahlen

A) Einleitung

Fällt ein Bündel von Molekularstrahlen auf die Oberfläche eines Kristalls ein, so können die Molekeln nach den gewöhnlichen Gesetzen der Reflexion reflektiert werden. Da aber ihre De Brogliesche Wellenlänge dieselbe Größenordnung wie der Gitterabstand hat, kann auch eine merkliche Beugung stattfinden¹⁾. Die Richtung der gebeugten Strahlen kann ebensogut aus den elementaren Überlegungen der Wellenoptik, als auch aus der Berücksichtigung der möglichen Impulsübertragungen vom Gitter erhalten werden²⁾. Die einfache Brechung der Strahlen ist wegen der praktischen Undurchdringlichkeit des Kristalls ausgeschlossen, es kann aber Adsorption — und eventuell auch Absorption — vorkommen.

Die Berechnung der Intensität der reflektierten und gebeugten Strahlen stellt für die Quantenmechanik ein prinzipiell lösbares Problem dar, wenn die Wechselwirkung zwischen Molekeln und Kristalloberfläche als Anfangsdatum aufgefaßt wird. Bevor dieses Problem theoretisch angegriffen wurde, haben Frisch und Stern³⁾ festgestellt, daß solche Intensitäten als Funktionen der Einfallsparemetern (Richtung, Impuls und Energie) merkliche Unregelmäßigkeiten zeigen. In der Intensität des Beugungsspektrums erster Ordnung eines nicht-monochromatischen Molekularstrahls treten z. B. auffallende Einsattelungen (*Dellen*) auf. Frisch⁴⁾ hat eine experimentelle Gesetzmäßigkeit für das Auftreten der Dellen gefunden und darauf hingewiesen, daß die Erscheinung mit der Möglichkeit der Adsorption der Molekeln verknüpft sein könnte.

Die erste theoretische Erforschung der Beugung von Molekularstrahlen gehört einer Reihe von wichtigen Untersuchungen über die Wechselwirkung zwischen Molekeln und Kristalloberflächen, die unter der Leitung von Lennard-Jones durchgeführt wurde⁵⁾. Die Erscheinung der „selective adsorption“ wurde theoretisch entdeckt und es zeigte sich, daß die Bedingung für ihr Auftreten die gleiche Form wie das Frischsche Gesetz über das Auftreten der Dellen hat. Darin ist schon wesentlich die qualitative Erklärung der Dellen enthalten. Die Untersuchung der englischen Forscher wurde aber eher

1) I. Estermann u. O. Stern, Ztschr. f. Phys. 61. S. 95. 1930; O. Stern, Naturw. 17. S. 391. 1929.

2) Vgl. Fußnote 1) S. 402.

3) S. Frisch u. O. Stern, Ztschr. f. Phys. 84. S. 430. 1933.

4) S. Frisch, Ztschr. f. Phys. 84. S. 443. 1933.

5) A. F. Devonshire, Proc. Roy. Soc. (A) 156. S. 37. 1936; J. E. Lennard-Jones u. A. F. Devonshire, Nature 137. S. 969. 1936; Proc. Roy. Soc. (A) 158. S. 253. 1937.

zur Benutzung der Frisch-Sternschen Ergebnisse, um Auskünfte über die Kristalloberflächen zu erhalten, als zum besseren Verständnis der Beugungserscheinungen eingerichtet.

Gerade dieses bessere Verständnis bildet dagegen den Zweck der vorliegenden Untersuchung¹⁾. Als wesentliche Züge habe ich einerseits die enge Analogie mit den optischen Beugungsanomalien, andererseits eine zwar triviale, aber vielleicht in ihrer Tragweite nicht bekannte Eigenschaft sehr vieler Resonanzerscheinungen verfolgt. Diese beiden Züge weisen deutlich auf den gemeinsamen formellen Grund vieler — scheinbar ganz verschiedener — physikalischer „Anomalien“ hin. Die folgende Diskussion ist aber noch hauptsächlich qualitativ, und stellt sich das Ziel, die Natur der Erscheinungen zu verstehen; auf die möglichen Erweiterungen wird nur hingewiesen.

B) Diskussion

Bei der Beugung von Materie- (ebenso wie von Licht-) Wellen an einem Reflexionsgitter handelt es sich darum, eine einlaufende und mehrere auslaufende Wellen — besser: ein Fourierintegral von auslaufenden Wellen — linear zusammenzusetzen, so daß die Wellengleichung unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit dem Gitter befriedigt wird. Die Wechselwirkung zwischen Molekularstrahlen und Kristallgittern werden wir nach 3 Modellen (sukzessiven Näherungen) darstellen. Das hat aber nur subjektive Gründe — um die Erscheinung besser zu analysieren —, da jedes gröbere Modell als das dritte wahrscheinlich unbefriedigend ist.

Zuerst (*Modell 1*) kann man sich die Gitteroberfläche als unperiodische undurchdringliche²⁾ (d.h. vollkommen reflektierende) Wand vorstellen. Im Falle von Materiewellen wird diese Wand durch eine unendlich hohe Potentialwand dargestellt und man kann vor dieser Wand in derselben Näherung — als eine Mulde — eine Schicht negativen unperiodischen Potentials hinzufügen (das Potential stellt natürlich die Van-der-Waalschen Kräfte dar). Nun kann man als Gitterwirkung (*Modell 2*) eine zusätzliche Schicht negativen zeitlich konstanten Potentials einführen, das die Periodizität des Ober-

1) Manche Gesichtspunkte werden erreicht, die über die von Lennard-Jones und Devonshire hinausgehen. Die Devonshiresche Behandlung der „selective adsorption“ war unbefriedigend, da die entsprechende Übergangswahrscheinlichkeit im Falle einer einfallenden monochromatischen Welle divergierte.

2) Bezüglich der Beugung von Materiewellen scheint die Rolle der Absorption im Kristall ganz vernachlässigbar zu sein; desto weniger kann man von gewöhnlicher Brechung sprechen. Das stellt einen merklichen aber unwesentlichen Unterschied bezüglich dem Fall von optischen Wellen dar.

flächengitters besitzt. Das entspricht der Einführung der periodischen Grenzbedingungen im optischen Fall. Wegen der thermischen Schwingungen des Kristallgitters ist aber seine Wechselwirkung mit den Materiewellen nicht zeitlich konstant (*Modell 3*). Diese zeitliche Änderung verursacht Energieübertragungen zwischen Gitter und Teilchen, die kein unmittelbares optisches Analogon besitzen. Wir werden die qualitativen und quantitativen Rückwirkungen dieser Erscheinung auf die Behandlung des Modells 2 betrachten. Erst am Ende werden wir das Problem stellen, wie die Zukunft jener einfallenden Teilchen, die einen Energieaustausch mit den Gitterschwingungen erlitten haben, theoretisch und experimentell untersucht werden kann.

Modell 1. — Im optischen Fall behandelt man ein- und auslaufende ebene Wellen als Grundlösungen der Wellengleichung im Vakuum (vor dem Gitter). Die zur Gitterebene senkrecht stehende Komponente der Einfallrichtung kann imaginär sein; in diesem Fall werden wir von oberflächlichen statt von ein- und auslaufenden Wellen sprechen. Die Grenzbedingungen an der Gitterebene werden zuerst gar nicht berücksichtigt. Genau dasselbe Verfahren kann man bei den Materiewellen anwenden; die Potentialmulde vor der Wand bedingt keine wesentliche Änderung.

Mit Paaren von entsprechenden ein- und auslaufenden Wellen kann man in beiden Fällen stehende Wellen bilden, die den Bedingungen an der (ebenen) Grenzfläche genügen: diese Wellen stellen den einfachen gewöhnlichen Reflexionsvorgang dar¹⁾. Wenn die Impulskomponente parallel zum Gitter festgestellt ist, besteht noch bei gegebener Energie allgemein eine Zweideutigkeit im Vorzeichen der Impulskomponente senkrecht zum Gitter. Dieser Zweideutigkeit entspricht die Existenz von ein- und auslaufenden Wellen (d. h. von zwei unabhängigen Integralen der Wellengleichung)²⁾. Wenn aber die Impulskomponente senkrecht zum Gitter komplex ist, verschwindet die Zweideutigkeit wegen der Bedingung des Endlichbleibens. So kann man nicht Paare von Wellen komplexer Einfallrichtung zusammensetzen um die Grenzbedingung zu befriedigen. Sonderfälle treten aber auf: in der Optik bei den Sommerfeldschen Oberflächenwellen, im Fall von Materiewellen bei Zuständen, die adsorbierte Teilchen darstellen; diese zwei Erscheinungen möchte ich nun vergleichen²⁾. Es wurde (bes. im Anh. II) gezeigt, wie die

1) In entsprechender Weise kann man bei durchsichtigen Medien die Brechung hinzufügen.

2) Vgl. die frühere Diskussion über die Ausstrahlungsbedingung und die Eigenschwingungen: S. 401, Fußnote 2) und Anhang II.

Sommerfeldschen Wellen bei sehr großer Leitfähigkeit des metallischen Gitters einen kaum gedämpften Strom von Lichtquanten darstellen, der durchschnittlich parallel zur Grenzfläche — in der Tat aber hin und her — läuft. Die Dämpfung parallel zur Grenzfläche entspricht der Absorption von Lichtquanten durch die Metallelektronen; da diese Absorption zuerst kein Analogon bei den Materiewellen findet, möchten wir vielleicht die Materiewellen mit dem extremen optischen Fall unendlicher Leitfähigkeit vergleichen. Dieser Fall stellt aber gewissermaßen eine Entartung dar, da die entsprechenden Wellen wohl ohne Dämpfung aber nicht nur oberflächlich laufen. Ein reiner Fall von oberflächlichen Wellen tritt dagegen bei den Materiewellen auf. Die oberflächlichen Van-der-Waals-schen Kräfte gestatten nämlich die Bildung von Materiewellen, die — so zu sagen — in der Potentialmulde enthalten sind und in unserer Näherung keine Dämpfung parallel zum Gitter erleiden¹⁾. Sie haben außerhalb der Potentialmulde die Züge von ebenen Wellen aus komplexer Einfallsrichtung, in der Mulde selbst von senkrecht zur Oberfläche stehenden Wellen. Bei gegebener Energie besitzen die optischen wie die materiellen Oberflächenwellen nur ein diskretes Spektrum in bezug auf ihren Impuls (das Spektrum besteht aus einem oder meistens einigen Kreisen im Impulsraum). Umgekehrt bei gegebener Impulskomponente parallel zum Gitter besitzen die Oberflächenwellen nur ein diskretes Spektrum von Eigenwerten der Energie.

Modell 2. — Die Einführung der Periodizität des Gitters bewirkt, daß die Lösung der Wellengleichung unter Befriedigung der Grenzbedingungen nicht mehr durch Zusammensetzung einer einlaufenden und einer einzigen auslaufenden Welle erhalten werden kann. Wir haben im optischen Fall gesehen, daß die Gitterwirkung durch ihre Fourierentwicklung wie eine Störung aussieht, die gewissen Impulsmengen auf die einzelnen Wellen des Modells 1 überträgt²⁾. Diese Störung wirkt also als Kopplung zwischen allen Wellen des Modells 1, deren Impulskomponenten parallel zum Gitter durch die Impulsübertragungen vom

1) Entsprechend dem Gedankengang der Fußnote 2) S. 401 sind also diese Wellen als eigentliche Eigenschwingungen zu bezeichnen.

2) Vgl. die Fußnoten: 1) S. 402 u. 1) S. 407. Die oberflächliche Potential-schicht eines kubischen Gitters mit Gitterabstand $2\pi/a$ kann z. B. als:

$$V(x, y, z) = \sum_{n_x, n_y = -\infty}^{\infty} V_{n_x, n_y}(z) e^{i u (n_x x + n_y y)}; \quad V_{n_x, n_y} = V_{-n_x, -n_y} = \dots$$

dargestellt werden. Die möglichen Impulsübertragungen sind dann durch: $e^{i u (n_x x + n_y y)}$ ausgedrückt.

Gitter selbst ausgeglichen werden können¹⁾. Wir müssen also eine Lösung der Wellengleichung bilden, die jene auslaufenden und oberflächlichen Wellen des Modells 1 enthält, welche durch die Gitterwirkung mit der einlaufenden Welle gekoppelt sind.

Die Bestimmung dieser Lösung wurde im optischen Fall auf die Lösung eines Systems unendlich vieler algebraischer linearer inhomogener Gleichungen zurückgeführt (in dem die Inhomogenität aus der primären Erregung bestand). Das System wurde durch Entwicklung nach Potenzen der Kopplung (damals als Tiefe der Gitterstreifen charakterisiert) gelöst. Bei den Materiewellen ist das Problem etwas komplizierter, da die Wirkung des Gitters nicht unendlich schmal (d. h. keine Grenzbedingung) ist. Wir erhalten nun ein System differentieller²⁾ statt algebraischer Gleichungen, deren Lösungen nur außerhalb der Potentialmulde als ebene Wellen dargestellt werden können. Das System der Lösungen muß weiter der (nicht periodischen) Grenzbedingung an der Potentialwand genügen. Die übrigen Eigenschaften des Systems und auch die Potenzentwicklung (mit ihrer Konvergenzbedingung) sind in beiden Fällen ähnlich³⁾.

Trotz der größeren Komplikation kann man sich vorstellen, wie man das Problem für die Materiewellen parallel zum optischen Problem behandeln kann. Dieselbe Methode (wesentlich die der sukzessiven Näherungen) mit Entwicklung nach Potenzen des periodischen Potentials⁴⁾ gestattet, das Problem zur Lösung der Wellengleichung bezüglich einzelner auslaufender (oder oberflächlicher) Wellen mit gegebener Impulskomponente parallel zum Gitter und gegebener Energie zurückzuführen. In dieser Gleichung erscheint die Kopplung mit den anderen Wellen als bekannte äußere Störung (Inhomogenität). Devonshire⁵⁾ ist es gelungen, die Wellengleichung für den Fall von auslaufenden Wellen zu lösen. Dieses Resultat können wir uns folgendermaßen vorstellen: wenn eine Lösung der inhomogenen Gleichung mit der Grenzbedingung an der Wand eine stehende Welle darstellt, erhält man eine auslaufende Welle durch Summation mit einer Lösung der entsprechenden homogenen Gleichung (d. h. mit einer Welle des Modells 1).

1) Da die Gitterwirkung senkrecht zum Gitter selbst unperiodisch ist, so kann sie in dieser Richtung beliebige Impulsmengen übertragen.

2) Die Differentiation bezieht sich natürlich auf die Richtung senkrecht zum Gitter.

3) Vgl. S. 407 und ebenda Fußnote 1).

4) In der ersten Näherung tritt natürlich nur die Kopplung mit der einlaufenden Welle auf.

5) A. F. Devonshire, a. a. O.; bes. Proc. Roy. Soc. 156. S. 41.

Im Fall von Oberflächenwellen (d. h. von Wellen, deren Impulskomponente parallel zum Gitter so groß ist, daß sie nach außen exponentiell abnehmen müssen) besitzt die inhomogene Gleichung allgemein eine Lösung, die den Randbedingungen genügt, während die entsprechende homogene Gleichung keine Lösung besitzt. Wenn diese letzte Gleichung eine Lösung besitzt (Sonderfälle: adsorbierte Wellen des Modells 1¹⁾), existiert dagegen bekanntlich keine Lösung der inhomogenen Gleichung¹⁾. Bei gegebener Impulskomponente parallel zum Gitter tritt der Sonderfall allgemein nicht auf: wenn aber die Energie zu einem Eigenwert der homogenen Gleichung strebt, kann man sich überzeugen, daß die Lösung der inhomogenen Gleichung sehr groß wird. *Das Fehlen der Lösung im Sonderfall deckt also in der Tat eine Singularität.*

Zur vollständigen Veranschaulichung des Sonderfalls wollen wir noch die Bedingungen für sein Auftreten wiederholen. In der Diskussion des Modells 1 (d. h. der Wellengleichung ohne Singularität) haben wir gesehen, daß bei gegebener Energie die materiellen Oberflächenwellen ein Spektrum im Impulsraum besitzen, welches aus einigen Kreisen besteht. Das Auftreten des Sonderfalls im Modell 2 ist also dadurch bedingt, daß der Impuls der einlaufenden Welle durch die Impulsübertragungen des Gitters in solcher Weise verwandelt werden kann, daß sein darstellender Punkt auf einem der genannten Kreise liegt. Trifft dieser Fall zu, so besitzt der homogene Teil einer von den inhomogenen Wellengleichungen des Systems eine Eigenfunktion, und die inhomogene Gleichung selbst ist nicht zu lösen²⁾.

Es ist nun klar, daß unser Sonderfall dem Auftreten von Rayleighschen Bedingungen in der Theorie der optischen *vollkommen reflektierenden* Gitter genau entspricht. Auch die anschauliche Deutung der R.B., die im optischen Fall gegeben wurde³⁾, kann auf unseren Fall angewandt werden. Der einzige Unterschied liegt darin, daß wegen der Potentialmulde die oberflächlichen Materiewellen eher dem Zustand von adsorbierten Teilchen als von tangentiell auslaufenden Teilchenstrahlen entsprechen; daher wird die Form der Bedingung nicht mehr die ursprüngliche Ray-

1) Es gibt nämlich keinen Grund, um vorauszusetzen, daß die Eigenlösung orthogonal zur Inhomogenität ist.

2) Mit etwas anderer Methode hat Devonshire die Singularität als scharfes Maximum der Adsorptionswahrscheinlichkeit gedeutet und den entsprechenden Vorgang „selective adsorption“ genannt. Wir werden uns überzeugen, daß diese Deutung etwas roh, aber wesentlich richtig ist. Wir haben schon erwähnt, daß die eben besprochene Bedingung für das Auftreten des Sonderfalls mit dem Frischschen Gesetz übereinstimmt.

3) Vgl. S. 397 und Abb. 2.

leighsche Form besitzen. Wie im optischen Fall fällt also unsere Näherungsmethode beim Auftreten des Sonderfalls aus. Im optischen Fall wurde die Methode durch Berücksichtigung der endlichen Leitfähigkeit gerettet; wir hatten aber damals schon darauf hingewiesen, daß mit einer verbesserten Methode auch der extreme Fall lösbar sein muß. Diese Verbesserung zu behandeln, wird unsere nächste Aufgabe sein.

Der Gedankengang ist der folgende: die Methode der Entwicklung nach Potenzen der Kopplung versagt wesentlich, weil die einlaufende Welle sehr eng (in scharfer Resonanz) mit dem diskreten adsorbierten Zustand gekoppelt ist. Die Singularität existiert in der Tat nicht, weil auch die Kopplung des adsorbierten Zustands mit den auslaufenden Wellen sehr eng ist [„selective evaporation“ von Devonshire¹⁾]; in der Sprache der dynamischen Störungsmethode lautet das: trotz der starken „selective adsorption“ findet man nicht unendlich viele Teilchen im adsorbierten Zustand, weil die „selective evaporation“ vorhanden ist. Wir werden also die Singularität umgehen können, wenn wir schon im ersten Schritt der Näherungsmethode die Rückwirkung der auslaufenden Wellen auf die inhomogene Wellengleichung der Oberflächenwelle (Kopplung zweiter Ordnung) behandeln. Da diese Rückwirkung die Amplitude der Oberflächenwelle selbst enthält, so wird die entsprechende homogene Gleichung gestört; daher verschwindet ihre Eigenlösung und gleichzeitig die Unmöglichkeit, die inhomogene Gleichung zu lösen. Dieses Verfahren entspricht der Behandlung der endlichen Lebensdauer des adsorbierten Zustands und stammt aus der Störungstheorie der Schrödingergleichung; es kann aber wahrscheinlich auch in anderen Fällen (wie in der Rayleighschen Theorie) angewandt werden.

Wir haben schon gesehen, daß Devonshire die inhomogene Wellengleichung für die auslaufenden gebeugten Wellen in erster Näherung gelöst hat. Für die Oberflächenwellen wurde aber das Problem nicht angegriffen, da diese Wellen in erster Näherung praktisch unbeobachtbar sind. Erst in den Sonderfällen wird ihre Rückwirkung auf die auslaufenden Wellen so bedeutend, daß es un-

1) Die Bezeichnung „selective evaporation“ scheint mir etwas ungeeignet zu sein. Es ist nämlich für eine einlaufende Welle ein Sonderfall, mit einem adsorbierten Zustand des Modells 1 eng gekoppelt zu sein. Dann kann man wohl von „selective adsorption“ sprechen. Jeder stationäre adsorbierte Zustand, dessen Energie nur hinreichend groß ist, ist dagegen eng mit gewissen auslaufenden Wellen gekoppelt: im Rahmen unseres Modells kann man vielmehr keinen anderen Verdampfungsvorgang als die „selective evaporation“ annehmen.

genügend ist, sich auf die erste Näherung zu beschränken. Die Untersuchung dieser Rückwirkung, die als „Anomalie“ erscheint, bildet gerade den Gegenstand der Arbeit.

Zwei Umstände empfehlen uns nun nicht zu versuchen, die inhomogene Wellengleichung für die Oberflächenwellen direkt zu lösen. Zuerst sind nicht die Wellen selbst, sondern nur ihre Rückwirkung auf die auslaufenden Wellen praktisch interessant; zweitens ist diese Rückwirkung nur dann bedeutend, wenn die betreffende Oberflächenwelle mit einer Welle der „Sonderfälle“ übereinstimmt. Daher ist es günstig, die unbekannte Oberflächenwelle als eine Reihe der orthogonalen stationären Lösungen des Modells 1 darzustellen und von dieser Reihe nur jenes Glied zu betrachten, dessen Energie eventuell sehr nahe der Energie unseres Wellensystems ist. Die Rückwirkung auf die auslaufenden Wellen sieht so aus, als ob die Teilchen zuerst in einen Zwischenzustand (Eigenzustand des Modells 1) ohne Erhaltung der Energie übergegangen und nachher wieder herausgekommen sind. Die Berücksichtigung der natürlichen Breite des Zwischenzustands vermeidet, wie wir schon erwähnt haben, jede Singularität auch bei Übereinstimmung der Energie mit der Energie des Zwischenzustands selbst (d. h. bei Resonanz).

Die Berechnung verläuft genau nach der üblichen Methode der quantenmechanischen Störungsrechnung; deswegen werden wir direkt die Resultate geben. Das wichtigste Resultat besteht bei unserem Modell 2 in der Interferenz der durch direkte und indirekte Kopplung gebeugten auslaufenden Wellen; die Oberflächenwellen können nämlich keine Teilchen verschlucken. Nennen wir also 0 die einlaufende, 1 die auslaufende und n die oberflächliche Welle. Wenn die einlaufende Welle

$$(14) \quad e^{i(t_0 r) - i \frac{E}{\hbar} t}$$

und z die Richtung senkrecht zum Gitter ist, so hat die Welle 1 nach Devonshire die Form:

$$(15) \quad \frac{1}{\hbar v_{1z}} H_{10} e^{i(t_1 r) - i \frac{E}{\hbar} t},$$

wo H_{10} , wie üblich, das Matricelement der Störung bezeichnet. Unter Berücksichtigung der Welle n erhält man dagegen:

$$(16) \quad \frac{1}{\hbar v_{1z}} \left(H_{10} + \frac{H_{1n} H_{n0}}{E - E_n + \frac{i}{2} \Gamma} \right) e^{i(t_1 r) - i \frac{E}{\hbar} t},$$

wo E_n die Energie des Zwischenzustands, und

$$\Gamma = 2\pi \sum_i \frac{|H_{in}|^2}{D_i}$$

seine natürliche Breite ist; (D_i = Abstand der Energieniveaus der Art i , die \sum_i soll über alle Endzustände i mit Energie E erstreckt werden).

Wenn wir nun:

$$2 \frac{E - E_n}{\Gamma} = \varepsilon, \quad 2 \frac{H_{1n} H_{n0}}{\Gamma} = H_{10}^{(2)}, \quad \frac{H_{10}^{(2)}}{H_{10}} = \varrho e^{i\varphi}$$

setzen, ist der Verlauf der Intensität der Welle 1 als Funktion von ε durch folgende Formel gegeben:

$$(17) \quad I(\varepsilon) = \frac{(\varrho \cos \varphi + \varepsilon)^2 + (\varrho \sin \varphi + 1)^2}{1 + \varepsilon^2}.$$

Diese Formel wird im Anhang III allgemein diskutiert.

Nun haben wir eine Formel erhalten, deren Bedeutung ziemlich klar ist, und die merkliche Anomalien darstellen kann, auch wenn $H_{10}^{(2)}$ erheblich kleiner als H_{10} ist (d. h. bei $\varrho < 1$)¹⁾. Es handelt sich darum, zu diskutieren, inwieweit die Erklärung der Dellenerscheinung in (16) und (17) enthalten ist. Ebenso wie im optischen Fall ist aber hier *ein quantitativer Vergleich zwischen Theorie und Erfahrung unmöglich*, weil die Anfangsdaten der Theorie in ungenügendem Maß von der Erfahrung zur Verfügung gestellt werden.

Es scheint zuerst, daß die Dellenerscheinung allgemein in den Beugungsspektren der Materiewellen auftritt, während die Woodschen Anomalien einen Ausnahmefall darstellen. Das ist vielleicht auf den Umstand zurückzuführen, daß bei den optischen Gittern erst höhere Fourierkoeffizienten des Gitterprofils maßgebend sind, die selten groß sind (die tangentiell auslaufenden Wellen gehören nämlich allgemein zu Spektren höherer Ordnung). In den Frisch-Sternschen Versuchen treten dagegen Spektren höherer Ordnung nicht auf. Eine breitere Kenntnis der Dellenerscheinung wäre aber nötig, um diese Frage ernster beurteilen zu können.

Die Lennard Jones-Devonshiresche Erklärung der Dellen²⁾ ist die folgende: wenn die Möglichkeit der „selective adsorption“

1) Der Umstand, daß bei verschwindender Störung H , $H_{10}^{(2)}$ nicht verschwindet und daher $\varrho \rightarrow \infty$ strebt, bedeutet nicht, daß die Anomalie unendlich groß wird: sie verschwindet dagegen, da sie (bezüglich E statt ε) unendlich schmal wird.

2) J. E. Lennard-Jones u. A. F. Devonshire, Nature 137. S. 969. 1936.

vorhanden ist, wird dieser Mechanismus einen erheblichen Teil der Teilchen verschlucken und daher die Intensität der gebeugten auslaufenden Wellen vermindern. Diese Erklärung ist vielleicht wesentlich richtig, aber etwas roh; sie schließt sich jedenfalls an unseren Gedankengang nicht an. Die Adsorption ist nämlich kein Vorgang, der dem Formalismus unserer Modelle 1 und 2 fremd ist, und stellt also nicht „etwas anderes“ dar, welches Teilchen „verschlucken“ kann. Unser Formalismus behauptet dagegen, den Adsorptionsvorgang selbst zu enthalten, mit der einzigen Einschränkung, daß die Effekte der Gitterschwingungen bisher (d. h. in den Modellen 1 und 2) noch nicht berücksichtigt wurden. Die Beziehungen der Lennard Jones-Devonshireschen Theorie zu unserer Methode werden nach Aufheben der Einschränkung besser erläutert werden.

Unabhängig von diesen Beziehungen *heben wir aber die Möglichkeit hervor, daß die Formeln (16) und (17) die Dellenerscheinung schon genügend darstellen*: es ist „a priori“ nicht nötig, Prozesse der Art des Modells 3, die einen Intensitätsverlust für das gesamte System der Wellen bewirken, in Betracht zu ziehen, um die Existenz der Dellen zu verstehen. Die Unregelmäßigkeiten in den Beugungsspektren, die als Dellen gedeutet wurden, würden dann durch die Wirkung der adsorbierten Zustände aber ohne endgültige Adsorption erklärt. Diese Deutung wäre insofern von der bisherigen verschieden, als man nicht mehr von einer „Delle“ in einer sonst regelmäßigen Kurve, sondern von einem System „Mulde-Damm“ (Abb. 9 im Anh. III) sprechen würde. Die Anomalien der Reflexion hätten dieselbe Bedeutung; wegen der Erhaltung der Teilchen sollten sie aber komplementär zu den Dellen der Beugungsspektren sein (d. h.: eine Mulde im reflektierten sollte einem Damm im gebeugten Strahl entsprechen und *viceversa*: negatives Bild). Ist aber keine auslaufende gebeugte Welle vorhanden, so kann kein Bruchteil der Intensität in anomaler Weise von der reflektierten zu anderen Wellen verschoben werden; das Auftreten einer Delle im Spektrum der reflektierten Welle ist dann sicher durch das Modell 3 zu erklären.

Einerseits ist es also vielleicht möglich, die Dellenerscheinung ohne die Annahme zu erklären, daß die Wirkung der Vorgänge des Modells 3 maßgebend ist; andererseits gibt es bisher keine Gründe um auszuschließen, daß diese Wirkung sehr wichtig ist. Erst die eingehende Diskussion einer Menge experimentellen Materials, das heute noch nicht vorliegt, würde gestatten, auf den Fragenkomplex betreffend der Stellung unserer theoretischen Ausführungen gegenüber der Erfahrung eine Antwort zu geben.

Modell 3. In der Formel (16) haben wir in allgemeiner Weise die Breite Γ als Summe der Beiträge aller Zerfallsmöglichkeiten des Zustands n zusammengestellt. Dort war natürlich die Gesamtheit der Zustände i wesentlich durch die Gesamtheit der auslaufenden Wellen dargestellt. In der Tat muß man dagegen die Möglichkeit von Übergängen in Betracht ziehen, die von der Wechselwirkung der Teilchen mit den Gitterschwingungen verursacht werden (inkohärente Übergänge). Diese Wechselwirkung wurde bisher quantitativ nicht untersucht; deswegen kann man „a priori“ nicht beurteilen, wie groß ihr Einfluß auf Γ ist. Man könnte nur folgendes Verfahren vorschlagen: von der Diskussion der Intensität der verschiedenen Beugungsspektren kann man wahrscheinlich Auskünfte über die Größe der Matrixelemente H_{ik} erhalten; Γ ist andererseits von der experimentellen Breite der Dellen gegeben; dann kann man erkennen, ob die H_{ik} hinreichend groß sind, um die Größe von Γ zu erklären ohne die Annahme, daß sie hauptsächlich auf die inkohärenten Übergänge zurückzuführen ist. Erst eine eingehende Diskussion des ganzen experimentellen Materials würde aber gestatten, den Beitrag der theoretischen Unschärfe Γ von der unvermeidlichen experimentellen Unschärfe zu unterscheiden.

Es ist jedenfalls theoretisch festzustellen, daß die Anwesenheit der inkohärenten Vorgänge den qualitativen Verlauf der Beugung im Rahmen des Modells 2 (d. h. der kohärenten Vorgänge) schon beeinflussen kann, und daß dieser Einfluß ein Maß für die Intensitätsverhältnisse kohärenter und inkohärenter Vorgänge darbieten kann.

Die Diskussion der inkohärenten Vorgänge hat sich zuerst durch die folgenden etwas groben Überlegungen entwickelt. Wenn ein Teilchen einen energetischen Austausch mit dem Gitter erleidet, gehört es nicht mehr zum Wellensystem des Modells 2. Daher darf man gewissermaßen sagen, daß die Möglichkeit von inkohärenten Vorgängen eine Verminderung der Intensität der reflektierten und gebeugten Wellen bewirkt. Es liegt auch nahe zu denken, daß für ein adsorbiertes Teilchen die Wahrscheinlichkeit von inkohärenten Übergängen sehr groß sein kann, so daß diese Wahrscheinlichkeit hauptsächlich mit der „selective adsorption“ verbunden ist.

In der Wellenmechanik sieht dagegen die Sachlage etwas anders aus. Die genannten inkohärenten Übergänge können einfach als Übergänge gedeutet werden, bei denen der Zustand des Gitters verändert wird: die Eigenfunktion des Systems soll dann auch den Gitteranteil enthalten. Statt des in der Einleitung eingeführten zeitlich veränderlichen Potentials zwischen Gitter und Teilchen,

führen wir also ein Kopplungspotential zwischen verschiedenen Teilchen- und Gitter-Zuständen ein¹⁾. Von nun an ist das Rechen-schema dem Schema des Modells 2 ganz analog. Der Vorgang, den wir auch im folgenden „inkohärenten Übergang“ nennen werden, besteht eigentlich in der Kopplung von zwei Zuständen des Modells 1, denen nicht dieselbe Energie entspricht. Nun versteht man, daß die inkohärenten Übergänge nicht nur als Folge der früheren Adsorption stattfinden; sie können auch direkt auftreten. Ihre Wahrscheinlichkeitsamplitude wird wieder von einer Formel der Art (16) dargestellt:

$$(16') \quad H_{u_0} + \frac{H_{u_n} H_{n_0}}{E - E_n + \frac{i}{2} \Gamma}.$$

Es ist eine rein quantitative Frage, ob das zweite Glied viel größer als das erste ist, d. h. ob die inkohärenten Vorgänge hauptsächlich durch frühere „selective adsorption“ geschehen; eine entsprechende strenge Auswahlregel ($H_{u_0} = 0$) existiert nicht²⁾. Von vornherein dürfen wir also nur sagen, daß der Intensitätsverlauf

1) Diese Einführung kann folgendermaßen geschehen. Die van der Waals'schen Kräfte zwischen den einzelnen Gitteratomen und freien Molekeln werden durch ein Kugelsymmetrisches Potential $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|)$ dargestellt. Die Lage \mathbf{r}_n des Atoms n ist nicht fest; deswegen setzen wir:

$$\begin{aligned} V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|) &= V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n_0}|) - (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n_0}, \text{grad } V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n_0}|)) + \dots \\ &= V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n_0}|) - \sum_n (\mathbf{r}_n, \text{grad } V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n_0}|)) a_{p_n} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_n \mathbf{r}_{n_0})} + \dots \\ &\quad (a_{-p_n} = a_{p_n}^*) \end{aligned}$$

Man führt die Summe der Beiträge der einzelnen Atome n als Potential in die Zeitunabhängige Schrödingergleichung des Systems: Freies Molekül + Gitterschwingungen ein und faßt die a 's nach der Methode der „zweiten Quantelung“ als Operatoren auf. Der Umstand, daß die Wellenlänge \hbar/p immer größer als der Gitterabstand und als die Reichweite der Kräfte ist, gestattet weiter in den exponentiellen Faktoren \mathbf{r}_{n_0} durch \mathbf{r} zu ersetzen.

Als endliches Resultat erhält man statt des Potentials der Fußnote 2), S. 420:

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \sum_{n_x n_y} V_{n_x n_y} e^{i n_x x + n_y y} \\ n_x n_y &= -\infty \\ V_{n_x n_y} &= V_{n_x n_y}^{(0)}(z) + \sum_s V_{n_x n_y s}^{(1)}(z) a_{p_s} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_s \mathbf{r})} \end{aligned}$$

2) Die modellmäßige Vorstellung, daß die inkohärenten Übergänge nach früheren kohärenter Adsorption passieren sollen, ist mit der Vorstellung gleichwertig, daß auch die kohärente Beugung durch frühere Adsorption vorgehen soll.

der inkohärenten Vorgänge allgemeinen Gesetzen von der Art der Formel (16), d. h. ähnlich den Gesetzen des Modells 2, unterliegen muß.

Wir wollen nun die Frage diskutieren, wie die Intensitätsabnahme der auslaufenden Wellen wegen der inkohärenten Vorgänge geschehen kann. Die Grundhypothese des Näherungsverfahrens der Entwicklung nach Potenzen der Kopplung zwischen Zuständen des Modells 1 (d. h. nach Potenzen von H) besteht darin, daß die Amplitude aller kohärent (oder inkohärent) gebeugten Wellen klein gegenüber der Amplitude der einlaufenden (und der reflektierten auslaufenden) Welle ist. Geht man zu den Intensitäten über, so muß man erhalten, daß nach jedem Näherungsschritt die Summe der Intensitäten aller gebeugten Wellen gleich der Intensitätsabnahme der reflektierten Welle¹⁾, und daß *diese Abnahme klein ist*. Die Intensitätsabnahme der gebeugten Wellen selbst, als Folge der großen Intensität anderer gebeugter Wellen, ist dagegen ein Prozeß höherer Ordnung, der nur eine kleine Korrektur darstellen kann. Sind aber die inkohärenten Übergänge so intensiv, daß sie die Intensität der kohärenten Beugung wesentlich vermindern, so wird das Näherungsverfahren selbst schlecht sein.

Es scheint also, daß man zum folgenden Standpunkt gelangt: *entweder* die Dellen der Beugungsspektren sind nach dem einfachen Modell 2 zu erklären (die inkohärenten Vorgänge können aber immer die Breite beeinflussen) und die Dellen in der reflektierten Welle sind klein und zum Verlauf der gesamten Beugung komplementär, *oder* die gesamte Beugung bewirkt eine große Intensitätsverminderung in der reflektierten Welle. In diesem *letzten Fall* ist es sehr schwierig, die Rückwirkungen der Intensität der einzelnen gebeugten Wellen auf die anderen zu analysieren, *die Näherungsmethode versagt*, und es ist in jedem einzelnen Fall zu untersuchen, wie sie verbessert werden kann²⁾. Gerade dieser Fall (Versagen der Näherungsmethode) entspricht jedoch der *Lennard Jones-Devonshireschen qualitativen Vorstellung der Dellenerscheinung*³⁾, die also gewissermaßen als komplementär zu unserer Darstellung der Beugungstheorie erscheint.

Der Gedankengang unserer Methode läßt sich folgendermaßen zusammenfassen: Zuerst (nullte Näherung, Modell 1) tritt neben der einlaufenden Welle nur die reflektierte auslaufende Welle auf, die die gleiche Intensität wie die einlaufende hat. Als sukzessive

1) Vgl. Fußnote 1), S. 416.

2) Im Falle der optischen Gitter sind bekanntlich die Anomalien einfacher und leichter zu verstehen, wenn, wie im Gitter C, nur ein kleiner Bruchteil der Intensität gebeugt wird.

3) A. a. O. Fußnote 2), S. 425.

Näherung wird die kleine Kopplung mit den auslaufenden gebeugten Wellen gleicher (Modell 2) oder verschiedener (Modell 3) Energie eingeführt. Zufolge dieser Kopplung wird ein *kleiner* Teil der einfallenden Teilchen gebeugt statt reflektiert. Die gebeugten Wellen entstehen aber unabhängig voneinander; ihre Wechselwirkungen (höhere Näherungen der Entwicklung nach Potenzen der Kopplung) sollen als kleine Störungen auftreten, falls die Methode anständig konvergiert. *Die anschauliche Vorstellung der Übergänge zu den verschiedenen gebeugten Wellen als Prozesse „in Konkurrenz“ ist unserer Näherungsmethode ganz fremd: wenn diese Vorstellung wirklich zutrifft — d. h. wenn so viele Teilchen einen Prozeß erleiden, daß die Intensität der übrigen Prozesse vermindert wird — konvergiert die Näherungsmethode so schlecht, daß sie fraglich wird.*

Die Berücksichtigung der Kopplung höherer — d. h. zweiter — Ordnung ist aber im Rahmen der allgemein guten Konvergenz der Methode sehr wichtig, wenn sie gelegentlich — d. h. durch Resonanzerscheinungen — bedeutende Folgen hat. Solche Fälle lassen sich korrekt behandeln, und dürften die Anomalien erklären, die Gegenstand unserer Untersuchung sind. Über die Beziehungen zwischen Theorie und Erfahrung kann man leider nicht anderes als die Schlußbemerkung des Modells 2 wiederholen.

C) Hinweis auf die Weiterentwicklung

Bisher haben wir angenommen, daß eine strenge Unterscheidung zwischen kohärenten und inkohärenten Übergängen möglich ist. Das Spektrum der Schwingungen eines Kristalls besitzt aber sehr weiche Komponenten; es ist also praktisch ununterscheidbar, ob keine oder einige kleine Schwingungsquanten angeregt werden. Die Wirkung der Schwingungen kleiner Frequenz auf die Vorgänge, die nach dem Modell 2 beschrieben wurden, besteht nicht in der endgültigen Einfangung von Teilchen, sondern vielmehr in einer Art energetischer Streuung.

Der Gesichtspunkt der üblichen nicht stationären Störungsmethode der „Änderung der Konstanten“ ist vielleicht geeignet, um das Schicksal eines adsorbierten Teilchens zu untersuchen. Daß das Teilchen irgendwann die Oberfläche verlassen wird, scheint ziemlich wahrscheinlich zu sein. Es kommt nur auf die Gesetzmäßigkeiten der Wanderung durch die adsorbierten Zustände an. Man kann nämlich die Zeitdauer der Wanderung und besonders die Richtungsverteilung der Teilchen, die die Oberfläche verlassen, untersuchen.

Die Methode, die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung zu suchen, ist weniger anschaulich, indem sie nicht

gestattet, dem Verlauf des Vorgangs zu folgen. Sie gestattet dagegen, genauere Fragen über den Endzustand zu stellen. Diese Lösung wollen wir außerhalb der unmittelbaren Nähe des Gitters nach der im optischen Fall benutzten Methode als Superposition einer einfallenden Welle (primäre Erregung!) und eines Fourierintegrals darstellen:

$$\int c(p) e^{i(p \cdot r)} dp$$

(die Ausstrahlungsbedingung muß befriedigt werden). Im Fall des Modells 2 ist $c(p)$ nur für gewisse Werte von p von Null verschieden; d. h.:

$$(18) \quad c(p) = \sum_i c_i \delta(p - p_i).$$

Wegen der Wechselwirkung mit den Gitterschwingungen ist nun c eine praktisch stetige Funktion. Die Aufgabe liegt nun darin, über $c(p)$ wenigstens einige Auskünfte zu erhalten.

Bisher darf ich nur Folgendes sagen: 1. Ich sehe keinen Grund um auszuschließen, daß der größte Teil der einfallenden Teilchen sich näherungsweise nach dem Modell 2 benimmt; 2. die Unterscheidung zwischen Teilchen, die sich nach dem Modell 2 benehmen, und Teilchen, die wegen der inkohärenten Vorgänge „verloren gehen“, ist praktisch nicht streng; 3. der eventuelle Beweis, daß mehrfache inkohärente Vorgänge ebenso wie einzelne große Energieübertragungen zum Gitter unwahrscheinlich sind, würde uns das Bild anbieten, daß im Übergang von Modell 2 zum Modell 3 die δ in der Formel (18) sich ohne Sprünge auflösen, d. h. daß $c(p)$ eine glatte Funktion ist, die in der Nähe der Punkte p_i Maxima besitzt aber in der Weite praktisch verschwindet; 4. wenn dagegen (in der Sprache der dynamischen Störungsmethode) eine erhebliche Wahrscheinlichkeit besteht, daß Teilchen für lange Zeit wirklich adsorbiert werden und mehrere Übergänge in adsorbierte Zustände erleiden, wird $c(p)$ einen gleichförmigen Hintergrund besitzen.

Die Weiterentwicklung der bisherigen Überlegungen scheint also zu genauen quantitativen Fragen zurückzuführen. Sie darf vielleicht Gegenstand einer weiteren Untersuchung sein. Eine solche Untersuchung hätte die Bedeutung einer Theorie der Diffusion (im Impulsraum) eines Gases von adsorbierten Teilchen. Sie wäre besonders interessant, wenn Beugungsversuche mit monochromatischen Molekularstrahlen möglich wären, die direkt den Verlauf der Funktion $|c(p)|^2$ liefern würden.

6. Die Zusammenhänge mit einigen Beugungsanomalien von X-Strahlen und Elektronenstrahlen (Kossel- und Kikuchi-Kegel und besonders Kikuchi-Enveloppen)¹⁾

Wir kommen nun zu einer etwas anderen Art von Anomalien, deren Erklärung v. Laue qualitativ und teilweise quantitativ gegeben hat²⁾. Wir wollen im folgenden nur die Verwandtschaft mit den bisher diskutierten Anomalien, auf die v. Laue selbst kurz hingedeutet hat³⁾, näher erläutern. Der Einfachheit halber werden wir die experimentellen Tatsachen und die v. Laueschen Arbeiten (besonders die letzte) als bekannt voraussetzen, und nur den allgemeinen Gedankengang der Theorie wiederholen.

Man betrachte eine einfallende monochromatische — elektromagnetische oder elektronische — Welle, die aus einer gegebenen Richtung auf ein Kristallgitter einfällt. Wir sind für den Fall interessiert, daß bei besonderen Einfallsrichtungen die Lage von Gitteratomen mit Intensitätsmaximis (oder -minimis) des Wellenkomplexes im Innern oder an der Oberfläche des Kristalls zusammenfällt. Trifft dieser Fall zu, so folgt umgekehrt durch den Reziprozitätssatz, daß bei Emission oder inkohärenter Streuung von Strahlung durch die genannten Gitteratome die „besonderen Einfallsrichtungen“ sich als Richtungen maximaler (oder minimaler) auslaufender Intensität erweisen sollen. Um die experimentellen Erscheinungen dieser letzten Art zu verstehen, handelt es sich also darum, das Auftreten des für uns „interessanten“ Falls mit den entsprechenden Gesetzmäßigkeiten zu diskutieren, d. h. zu untersuchen, wann das Wellenfeld, das durch die Wirkung des (räumlichen oder oberflächlichen) Gitters auf eine einfallende Welle entsteht, merkliche Interferenzeffekte zeigt und wie die Interferenzen sich bezüglich der Lage der Atome verhalten.

1) Literaturangabe für die Kikuchikegel: S. Kikuchi, Proc. Imp. Ac. of Sc. 4. S. 271, 275, 354, 475. 1928; Jap. Journ. of Phys. 5. S. 83. 1928/29; Sh. Nishikawa u. S. Kikuchi, Nature 122. S. 726. 1928; G. P. Thomson, Nature 126. S. 55. 1930; G. Aminoff u. B. Broomé, Ztschr. f. Kristall. 89. S. 80. 1934; A. G. Emslie, Phys. Rev. 45. S. 43. 1934; für die Kosselkegel: W. Kossel, V. Loeck u. H. Voges, Ztschr. f. Phys. 94. S. 139. 1935; W. Kossel u. H. Voges, Ann. d. Phys. [5] 23. S. 677. 1935; für die Kikuchi-Enveloppen: K. Shinoara, Scient. Pap. Inst. Phys. Chem. Res. 18. S. 223. 1932; 20. S. 39. 1932; G. J. Finch, A. G. Quarrel u. H. Wilman, Trans. Faraday Soc. 31. S. 1051. 1935.

2) M. v. Laue, Ann. d. Phys. [5] 23. S. 705. 1935; 25. S. 569. 1936; Phys. Ztschr. 36. S. 544. 1936.

3) A. a. O.; bes. Phys. Ztschr. 36. S. 546. 1936. Herrn Prof. v. Laue verdanke ich die Anregung, diese Verwandtschaft zu untersuchen.

Das Feld im Innern des Raumgitters wird nach einer Fourierreihe entsprechend der Periodizität des Gitters zerlegt (von den Gitterschwingungen kann man nun absehen!). Merkliche Interferenzeffekte sind natürlich auszuschließen, wenn in der Fourierreihe das aus der einfallenden Welle entstehende Glied alle anderen Glieder überragt. Sie treten dagegen auf, wenn ein anderes Glied der Reihe wichtig ist, d. h. wenn eine intensive gebeugte Welle vorhanden ist. Diesen Fall — einschließlich der Lage der Interferenzen — hat v. Laue ausführlich durch die „dynamische Theorie der Raumgitter“ behandelt. Damit wurde die Erklärung der Kossel- und Kikuchi-kegel erhalten.

Wenn man nun die Wirkung des Oberflächengitters berücksichtigt — ohne sich zuerst darum zu kümmern, daß sie klein ist —, und dem Rechnung trägt, daß sie senkrecht zur Oberfläche unperiodisch ist, findet man natürlich, daß bei jeder Einfallrichtung gebeugte Wellen auftreten. Die gebeugte Welle ist aber wegen der Kleinheit der Oberflächenwirkung nicht intensiv; damit sie merkliche Interferenzeffekte mit der einfallenden Welle zeigt¹⁾, soll sie „konzentriert“ sein. Eine Konzentration findet in anschaulicher Weise statt, wenn die Welle parallel der Oberfläche läuft, da die Effekte der Beugung auf der ganzen Oberfläche in einer unendlich schmalen Wellenfront enthalten sind²⁾. Die Bedingung dafür, daß der einfallenden Welle durch oberflächliche Beugung eine tangentielle Welle entspricht, charakterisiert nun gerade die Einfallrichtungen, die dem Kikuchi-Enveloppen gehören. Diesen Zusammenhang hat v. Laue wahrscheinlich formell entdeckt und rückwärts darauf hingewiesen, daß die Kikuchi-Enveloppen der Oberflächenwirkung zuzuschreiben sind. Das Zusammenfallen mit der Rayleighschen Bedingung hat ihn zum Hinweis geführt, daß die Kikuchi-Enveloppen zusammen mit den Woodschen Anomalien erklärbar wären. Die tangentiellen elektromagnetischen oder elektronischen Wellen an der Oberfläche von Kristallgittern wurden aber bisher nicht näher untersucht.

Gehen wir nun zum Vergleich mit den in den vorigen Abschnitten diskutierten Erscheinungen über. Ein wichtiger Zug ist allen besprochenen Fällen — einschließlich der von v. Laue untersuchten Raumgitterinterferenzen — gemeinsam. Anomalien finden statt, wenn eine gebeugte Welle, die aus der Streuung von vielen Gitterelementen durch Interferenz entstanden ist, nochmals zusammen

1) Diese Interferenzeffekte dürften natürlich sowieso nur bei gebrochenen gebeugten Wellen für unsere Zwecke wirksam sein.

2) Die Analogie mit den Rayleighschen Bedingungen ist hier selbstverständlich.

mit der primären Welle auf weitere Gitterelemente einfallen kann. Dieser Umstand macht den Beugungsvorgang komplizierter und unanschaulich, wie es schon in der physikalischen Deutung der Rayleighschen Bedingung hervorgehoben wurde¹⁾. Die Phasenbeziehungen in der Interferenz der primären mit der gebeugten Welle werden von der Phasenverschiebung im ersten Beugungsvorgang bestimmt und bestimmen die Eigenschaften der Anomalien. Insofern sind also die Kossel- und Kikuchikegel mit den anderen Anomalien verwandt.

Ein Unterschied besteht aber darin: in den früheren Fällen spielte der anomale Vorgang auf dem Gitter die Rolle eines Vermittlers zwischen einfallenden und auslaufenden Wellen, nun ist der Vorgang selbst auf dem Gitter der Gegenstand der Untersuchung.

Es wäre nun wichtig, aus unserem Vergleich Gesichtspunkte zu erhalten, die eine eventuelle Untersuchung zur Herstellung der noch fehlenden Theorie der Kikuchi-Enveloppen erleichtern würden. Wenn die Elektronenwellen an der Oberfläche von Kristallgittern ähnliche Eigenschaften wie z. B. die Molekularwellen hätten, würde die Überlegung nahe liegen, daß im Fall von Einfallrichtung aus der Kikuchi-Envelope — entsprechend dem Fall von „selective adsorption“ — die Amplitude der oberflächlichen Wellen sehr groß ist; damit wäre die Erklärung der Erscheinung erreicht. Die Verhältnisse liegen nun bei den Elektronen ganz anders als bei den Molekularwellen. Die Unstetigkeit des Potentials an der Kristalloberfläche ist so klein gegenüber den verwendeten Elektronenenergien, daß die Elektronenwellen kaum gebrochen werden²⁾. Man dürfte also „a priori“ nicht erwarten, daß merkliche Oberflächeneffekte stattfinden und man kann zuerst nicht verstehen, wie intensive Oberflächenwellen auftreten, auf die die Existenz der Anomalien zurückgeführt werden soll. Andererseits zeigen die Versuche von Kirchner und Raether³⁾, daß die Oberflächenbeugung merklich ist, und es ist nicht zu bezweifeln, daß die Kikuchi-Enveloppen Oberflächeneffekten zuzuschreiben sind. In der Tat erst eine quantitative Theorie wird die Züge dieser Effekte nachweisen.

Der reine Vergleich mit den anderen Anomalien, die aus oberflächlichen Erscheinungen entstehen, liefert also an und für sich

1) Vgl. S. 396 u. 397.

2) In Wirklichkeit ist nicht nur die oberflächliche Unstetigkeit des mittleren Potentials, sondern auch der plötzliche Anfang des Raumgitters als Unperiodizität für die Oberflächeneffekte wirksam. Dieser Beitrag ist wahrscheinlich maßgebend.

3) F. Kirchner u. H. Räther, Phys. Ztschr. 33. S. 510. 1932; H. Räther, Ztschr. f. Phys. 78. S. 527. 1932.

keinen wesentlichen Beitrag zur Theorie der Kikuchi-Enveloppen. Die Theorie der genannten Anomalien stellt aber vielleicht ein Modell für eine weitere Untersuchung dar¹⁾.

7. Schlußbemerkungen

Wie schon in der Einleitung erwähnt wurde, war mein wesentliches Bestreben, statt einen geschlossenen mathematischen Formalismus zu entwickeln, den entsprechenden physikalischen Gedankengang und die innere Natur der fraglichen Erscheinungen zu erklären. Das Ziel war nämlich mehr, ein besseres Verständnis der wellenmäßigen Vorgänge an der Oberfläche der Gitter, als die rein formale Erklärung der „hellen Banden“ des Woodschen Gitters *C* zu erreichen. Rein formale Untersuchungen sind in diesem Gebiet auch deswegen unbefriedigend, weil der quantitative Vergleich von Theorie und Erfahrung fast immer unmöglich ist. Die theoretische Untersuchung der oben besprochenen Erscheinungen bietet heutzutage noch ein breites Arbeitsgebiet, obwohl es fraglich ist, ob es sich lohnt, verfeinerte Theorien zu entwickeln. Die hier benutzten Methoden dürfen vielleicht in anderen Gebieten angewandt werden.

Anhang I:

Zur Deutung der Fortpflanzung elektromagnetischer Wellen komplexer Einfallsrichtung durch die Stromlinien der Energie

Als Grundlösung der Wellengleichung:

$$\Delta \mathfrak{F} = \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \mathfrak{F}}{\partial t^2}$$

betrachten wir die Welle:

$$(1) \quad \mathfrak{F} e^{i k (a x + \beta y + \gamma z - c t)}$$

mit den Bezeichnungen:

$$(2) \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = \varepsilon + 4\pi i \frac{\sigma}{c k} = n^2 \quad k = \frac{2\pi \nu}{c}$$

1) Zusatz b. d. Korr.: Es ist inzwischen Herrn Lamla gelungen, eine quantitative Theorie der Kikuchi-Enveloppen zu entwickeln (Ann. d. Phys. [5] 32. S. 178 u. 225. 1938). Die Theorie scheint befriedigend zu sein, es ist mir aber bisher nicht gelungen, ihren physikalischen Inhalt zu beherrschen und besonders die Tragweite der Wirkung der Grenzfläche auf die Erscheinung zu verstehen: ich habe nämlich den Verdacht, daß diese Wirkung viel geringer ist, als man zuerst gedacht hat. Das wäre gewissermaßen aus verschiedenen Gründen befriedigend; da aber diese Frage augenblicklich (4. VI. 38) Gegenstand einer freundlichen Diskussion mit Herrn Lamla ist, darf man vielleicht zuerst erwarten, daß die Angelegenheit völlig geklärt wird. Herrn Lamla danke ich für die Überlassung seiner Arbeit vor dem Erscheinen herzlich.

Wenn der reelle Teil von (1) das magnetische Feld darstellt, wird das elektrische durch die Gleichung

$$\text{rot } \mathfrak{H} = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathfrak{D}}{\partial t} + 4\pi \sigma \mathfrak{E} \right)$$

geliefert; im umgekehrten Fall benutzt man

$$\text{rot } \mathfrak{E} = - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t}.$$

Wir betrachten hier den ersten Fall, der zweite unterscheidet sich davon unwesentlich.

Wir setzen nun:

$\alpha = \alpha' + i\alpha''$, $\beta = \beta' + i\beta''$, $\gamma = \gamma' + i\gamma''$, $u \equiv (\alpha', \beta', \gamma')$, $v \equiv (\alpha'', \beta'', \gamma'')$ und schreiben:

$$(1') \quad \mathfrak{H} e^{ik[(u, r) + i(v, r) - ct]},$$

$$(2') \quad n^2 = u^2 - v^2 + 2i(u, v) = \varepsilon + 4\pi i \frac{\sigma}{kc}.$$

Um die Maxwell'schen Gleichungen zu befriedigen, muß man zu (1') die weiteren Bedingungen

$$(\mathfrak{H}, u) = 0, \quad (\mathfrak{H}, v) = 0$$

hinzufügen.

Ist die Leitfähigkeit $\sigma = 0$ (also n^2 reell), so ist auch $(u, v) = 0$; aber erst die weitere spezielle Annahme $v = 0$ reduziert (1') zu einer gewöhnlichen ebenen Welle. Das Analogon von $v = 0$, falls $\sigma \neq 0$ ist, ist:

$$v = \chi u$$

und stellt eine ebene gedämpfte Welle dar. Mit den Definitionen:

$$v = v' + v''; \quad (v', u) = 0, \quad v'' = \chi u$$

wird (1'):

$$(1'') \quad \mathfrak{H} e^{ik[(1 + i\chi)(u, r) + i(v', r) - ct]},$$

$\sigma = 0$ bedingt $\chi = 0$; der Sonderfall $v' = 0$ kennzeichnet die gewöhnlichen ebenen Wellen mit oder ohne Dämpfung¹⁾. Dieser Sonderfall ist physikalisch wichtiger, da er die Strahlung einer unendlich weiten Quelle darstellt; dagegen sieht man zunächst nicht, wie die Wellen mit $v' \neq 0$ erregt werden können. Weiter bleibt (1'') mit $v' \neq 0$ nicht überall endlich; solche Wellen treten also nur bei in der Richtung $-v'$ begrenzten Medien auf; da sie nun von der Grenze her in der Richtung v' gedämpft sind, sind sie auch schwer zu beobachten. Dem bekanntesten Beispiel dieser Wellen begegnet man bei der Totalreflexion; ihre Existenz läßt sich auch dort nicht so leicht experimentell nachweisen. Dieses Beispiel zeigt wie diese Wellen erregt werden können: eine ebene Grenzfläche — z. B. $z = 0$ — wirkt als Quelle, die von elektromagnetischen (durch das untere Medium) erzwungenen Schwingungen durchlaufen wird; diese Schwingungen laufen z. B. in Richtung x mit der Wellenlänge:

$$\lambda < \frac{c}{\nu \text{Re}(n^2)}; \quad (\nu = \text{Frequenz}; n^2 \text{ entspricht dem oberen Medium.})$$

Im oberen Medium wäre nun keine ebene Welle mit $v' = 0$ möglich, die sich der anregenden Quelle anschließt; statt dessen tritt eine Welle mit $v' \neq 0$ und u tangentiell zur Quelle auf (da u , im wesentlichen die reziproke Wellenlänge, bei $v' \neq 0$ unbegrenzt groß sein kann).

1) Man kann auch $u = u' + u''$, mit $(u', v) = 0$, $u'' = \varphi v$ setzen; dann erhält die Welle die Gestalt:

$$(1''') \quad A e^{ik[(u', r) + (\varphi + i)(v, r) - ct]}.$$

Wir haben dadurch ein mathematisches Bild für das Auftreten der Wellen mit $v \neq 0$ geschaffen. Ich möchte aber die physikalische Aussicht klar machen. Wenn wir das Huyghenssche Prinzip der Ausstrahlung auf unsere Oberflächenquelle anwenden, können wir uns leicht überzeugen, daß die von den verschiedenen Punkten der Quelle ausgesandten Wellen genügend weit von der Oberfläche vollständig interferieren. Andererseits tritt die Strahlungsenergie von der Oberfläche ins obere Medium ein, und es gibt einen Energieflux parallel der Oberfläche; wohin läuft aber die Energie? Um das zu verstehen, möchte ich die Stromlinien der Energie (d. h. des Poyntingsschen Vektors) untersuchen.

Die Vektoren u, v' seien bzw. den x, y, z -Achsen parallel; das Medium sei — der Einfachheit halber — leer; also:

$$\sigma = v' = \chi = 0; \quad \epsilon = 1; \quad |u| = u > 1; \quad |v| = v > 0.$$

Die Komponenten des Poyntingsschen Vektors sind dann:

$$P_x = u A^2 \cos^2 k(u x - c t) e^{-2k v z}, \quad P_y = 0,$$

$$P_z = -v A^2 \sin k(u x - c t) \cos k(u x - c t) e^{-2k v z}.$$

Stellen wir diesen Vektor für jeden einzelnen Punkt durch einen Pfeil OP dar, so beschreibt P im Laufe der Zeit eine Ellipse mit einem Scheitelpunkt im Ursprung und mit zu x und z parallelen Achsen. Wir können uns die Stromlinien als differentiell erzeugt denken: die Energie läuft während der Zeit dt von jedem Punkt r ein Intervall $c \cdot dt$ weiter in der Richtung $\mathfrak{P}(r, t)$; da die Richtung

$$\mathfrak{P} \left(r + \frac{\mathfrak{P}}{P} c dt, t + dt \right)$$

allgemein von $\mathfrak{P}(r, t)$ verschieden ist, wird die Stromlinie krumm sein.

Es sei nun $z = z(t)$, $x = x(t)$, $y = \text{const}$ eine Stromlinie; den Parameter t eliminieren wir durch:

$$c t = \int_{x_0}^{x z} \sqrt{dx^2 + dz^2}.$$

Es ist also:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{P_z}{P_x} = -\frac{v}{u} \tan k \left(u x - \int_{x_0}^x \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx} \right)^2} dx \right),$$

d. h.:

$$k \left(u x - \int_{x_0}^x \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx} \right)^2} dx \right) = -\operatorname{arctang} \frac{u}{v} \frac{dz}{dx}$$

und durch Differentiation:

$$\left[u - \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx} \right)^2} \right] \left[1 + \frac{u^2}{v^2} \left(\frac{dz}{dx} \right)^2 \right] = -\frac{u}{v k} \frac{d^2 z}{dx^2}.$$

Man verifiziert leicht, daß die Geraden:

$$z = \pm v x + \text{const}$$

triviale Integrale dieser Gleichung sind, da gleichzeitig $\frac{d^2 z}{dx^2}$ und der Faktor

$u - \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx} \right)^2}$ verschwinden. Da der Faktor $1 + \frac{u^2}{v^2} \left(\frac{dz}{dx} \right)^2$ positiv ist,

so haben $\frac{d^2 z}{dx^2}$ und $u - \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx}\right)^2}$ entgegengesetztes Vorzeichen; wenn nun in einem Punkt $u - \sqrt{1 + \left(\frac{dz}{dx}\right)^2} \neq 0$ ist, kann es auf derselben Inte-

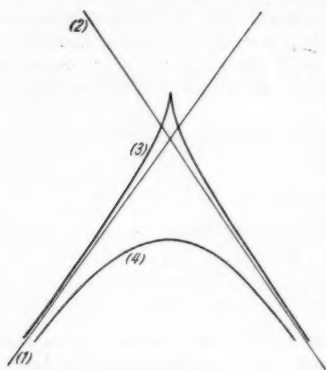


Abb. 7.

- (1) Triviales Integral $z = vx$
- (2) Triviales Integral $z = -vx$
- (3) Integral mit $\frac{d^2 z}{dx^2} > 0$
- (4) Integral mit $\frac{d^2 z}{dx^2} < 0$

(x_0, y_0, z_0) zur Zeit $t = t_0$ ausgestrahlt wird, wird also mit Geschwindigkeit c die Integrallinie durch (x_0, y_0, z_0) mit $\left(\frac{dz}{dx}\right)_{x=x_0} = \frac{P_x}{P_z}$ durchlaufen.

Als Beispiel möchte ich das Schicksal der von den Punkten:

$$0 \leq x \leq \frac{\pi}{ku}{}^1; \quad y = 0; \quad z = 0$$

zur Zeit $t = 0$ ausgestrahlten Energie untersuchen. Für $ku x = 0$ ist $P_x = 0$, die Neigung also Null; die Energie wird dem Integral 4 vom Scheitelpunkt an folgen (Abb. 8); das ist vom differentiellen Standpunkt selbstverständlich: nach einem ersten kleinen Schritt mit Geschwindigkeit c in der Richtung x hat die Energie gegenüber der Phase Zeit gewonnen; es ist schon $P_x < 0$; die Bahn wird immer weiter abgelenkt; die x -Komponente der Energiegeschwindigkeit, und zugleich der Zeitgewinn, nimmt aber immer ab, in dem die Neigung zu $-v$ strebt; der asymptotische Verlauf nimmt also die Richtung eines trivialen Integrals der Art 2. Bei etwas größerem $ku x > 0$ sind die Beziehungen identisch; nur der Anfangswert der Neigung ist schon für $t = 0$ negativ. Wenn aber $ku x = \arctang u$ ist, wird die Energie einfach einem

grallinie nie mehr verschwinden, sonst würde sich das Integral mit einem anderen (trivialen) Integral verbinden, was absurd ist. Wir haben also Integrale mit stetig positivem und mit stetig negativem $\frac{d^2 z}{dx^2}$. Den wahrscheinlich

komplizierten analytischen Ausdruck dieser zwei Arten Integrale habe ich nicht aufstellen können; ihr Verlauf ist aber in der Abb. 7 qualitativ dargestellt, und kann sowohl physikalisch als mathematisch gerechtfertigt werden. Alle anderen Integrale werden von den hier dargestellten durch beliebige Verschiebung in der (x, z) Ebene erhalten.

Das physikalische Problem ist, die Bahnen als Funktionen der Zeit zu finden. Durch jeden Punkt laufen ∞^1 Integrale mit jedem Wert von $\frac{dz}{dx}$; im Punkt (x_0, y_0, z_0) zu der Zeit $t = t_0$ ist $\frac{P_x}{P_z}$ definiert; die Energie, die von

1) Die Periode des Poyntingschen Vektors ist ja doppelt so klein als diejenige der Wellen.

trivialen Integral der Art 2 folgen. Bei noch größeren Werten von kux ist die x -Komponente der Energiegeschwindigkeit zu klein; die Energie verliert also Zeit gegenüber der Phase, das zuerst große negative P_x wird immer absolut kleiner; die Energie folgt einem Integral der Art 3 rechtsseitig der z -Achse. Bei $kux = \frac{\pi}{2}$ ist $\beta = 0$ und man hat keinen Energiestrom. Bei noch größerem kux ist die Neigung zunächst stark positiv mit Zeitverlust gegenüber der Phase; die Neigung steigt bis ∞ ; gleichzeitig verschwindet β und später wird $P_x < 0$; ein Rückkehrpunkt tritt auf und man kommt wieder auf denselben Fall wie bei $\arctang u < kux < \frac{\pi}{2}$ (Integral der Art 3). Das triviale Integral 1 tritt bei $kux = \pi - \arctang u$ auf; bei noch größeren Werten von kux ist die Neigung zuerst positiv klein; es gibt also Zeitgewinn und die Neigung strebt zuerst auf Null und später zu $-v$ (Integral der Art 4).

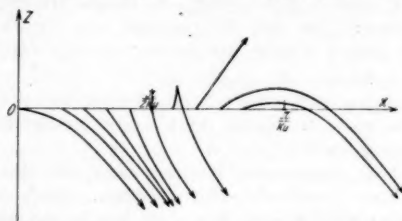


Abb. 8. Stromlinien der Energie, die zu der Zeit $t = 0$ von den Punkten der Achse x ausstrahlt wird

Die Energie läuft zuletzt immer in der Richtung mit Neigung $-v$, d. h. nach unten; sie kann aber vorher steigen. Dadurch kann man den physikalischen Mechanismus dieser Wellen verstehen. Die Stromlinien verdünnen sich in der positiven z -Richtung und umgekehrt; das ist eine Äußerung der Dämpfung der Wellen; der Faktor e^{-2kvz} in P bewirkt, daß das Vektorfeld P trotz der verschiedenen Dichte der Stromlinien im Zeitmittel divergenzfrei ist.

Wenn $u \rightarrow 1$ und $v \rightarrow 0$ streben, streben die trivialen Integrale und die endgültige Stromrichtung zur Richtung der Achse x ; die nach oben ausgestrahlte Energie schreitet immer weiter nach größeren Werten von z fort; so daß die Erscheinung zur Symmetrie bezüglich der Achse z strebt.

Im idealen Fall eines leitenden Metalls ohne Erzeugung von Joulescher Wärme für optische Frequenzen ($s < 0$, $\sigma < 0$) sind die Stromlinien von derselben Art (aber $v \gg u$); sie werden jedoch im entgegengesetzten Sinne durchlaufen¹⁾. Auf die Deutung des negativen s ist hier nicht einzugehen. Bei kleinen Werten von σ (realen Metallen) tritt keine wesentliche Änderung auf gegenüber dem Fall $\sigma = 0$.

Anhang II:

Zum Veranschaulichen der Quasi-Eigenschwingungen

In der Fußnote 2), S. 401, haben wir erwähnt, daß in Systemen der Art unseres Gitters das Auftreten elektromagnetischer Eigenschwingungen durch die Ausstrahlungsbedingung ausgeschlossen ist, daß aber Wellensysteme möglich

1) D. h. die Energie läuft im Zeitmittel in entgegengesetzter Richtung zur Phase.

sind, die als *Quasi-Eigenschwingungen* bezeichnet werden können. Diese Wellen bilden den *Teilkomplex*, der nach der Überlegung von S. 412 mit den Sommerfeldschen Oberflächenwellen gleichbedeutend ist, und spielen die Hauptrolle in der Deutung der Woodschen Anomalien. Sie entsprechen außerordentlich kleinen Werten der Determinante, von der in der zitierten Note die Rede ist, und welche in unserem Fall gleich $n^2\gamma + \nu$ ist.

Ich möchte nun diese Vorgänge besser erläutern, und damit den Ausdruck „Quasi-Eigenschwingungen“ rechtfertigen. Das soll keine strenge Darstellung sein, sondern nur besondere Gesichtspunkte unterstreichen.

Sämtliche Probleme, von denen in Abschn. 3 und 4 die Rede ist, dürfen wir folgenderweise zusammenfassen: an der ebenen Grenzfläche zwischen Vakuum und homogenem materiellen Medium erzeugt die primäre Erregung eine elektromagnetische Schwingung, die in der Richtung x nach $e^{ik(ax - ct)}$ fortschreitet¹⁾; es handelt sich darum, in beiden Medien die erzwungene Schwingung zu finden (für das Gitterproblem vgl. die Fußnote 1, S. 407). Über diese Schwingungen können wir aus physikalischen Gründen annehmen, daß sie in beiden Medien die Gestalt $A e^{ik(ax + \gamma z - ct)}$, mit $\alpha^2 + \gamma^2 = n^2$, haben; die Amplituden sind zunächst unbestimmt. Die primäre Schwingung an der Grenzfläche wirkt als Quelle, die eine gewisse Energiemenge pro Zeiteinheit zur Verfügung stellt.

Die Eigenschwingungen sind Wellensysteme, die den Maxwell'schen Gleichungen und den Grenzbedingungen genügen, deren Energieflux divergenzfrei ist, die also keine Energie von einer Quelle verlangen. In der Fußnote 2, S. 401, ist erwähnt, daß Eigenschwingungen mit der Ausstrahlungsbedingung unverträglich sind und daß die Brewstersche Brechung bei durchsichtigen Medien und die Sommerfeldschen Oberflächenwellen bei leitenden Medien Beispiele von Eigenschwingungen mit einer einzigen ebenen Welle in jedem Medium bieten.

Wir wollen nun die Quasi-Eigenschwingungen aufsuchen, d. h. ein System mit je einer Welle über und unter der Grenzfläche finden, das der Ausstrahlungsbedingung genügt und möglichst kleine Anregungsenergie von der Quelle verlangt. Die Ausstrahlungsbedingung und die Bedingung des Endlichbleibens bestimmen die Vorzeichen von γ und ν ²⁾. Werte von α , denen reelle Werte von γ und ν entsprechen, sind auszuschließen: man müßte nämlich im Gegensatz zu unseren Zielen einen kontinuierlichen Energiestrom von der Grenzfläche ins Unendliche ernähren. Die Verhältnisse sind ganz anders, wenn die Wellen in beiden Medien komplexe Einfallsrichtungen haben. Nach den Resultaten des Anhangs I können wir denken, daß in solchen Bedingungen die Energie längs der Grenzfläche hin und her ohne Verluste ins Unendliche laufen kann³⁾. Energie wird von der Quelle verlangt, um die Joulesche Wärme der effektiven Ströme auszugleichen; die Konstante σ , die

1) Das magnetische Feld ist parallel der y -Achse polarisiert.

2) ν bezeichnet, wie oben, $-\gamma$ für das untere materielle Medium.

3) Man erhält das mit einem System von zwei Wellen der Art ($1''$); im Vakuum ist:

$$u' = (u, 0, 0); \quad \varphi = 0; \quad v = (0, 0, v)$$

und im Metall:

$$u' = (u, 0, 0); \quad \varphi = \varphi; \quad v = (0, 0, v_M).$$

In beiden Medien läuft die Energie immer wieder nach der Grenzfläche.

für solche Ströme maßgebend ist, ist aber in durchsichtigen Medien gleich Null und in Metallen für optische Frequenzen nicht sehr wichtig. Dazu sind die Stromlinien in den Metallen wegen der großen negativen Werte von ϵ sehr krumm, d. h. die Energie, die ins Metall eintritt, wird bald herausgeworfen; die Verluste für Joulesche Wärme sind also jedenfalls nicht sehr groß.

Viel wichtiger ist die Verwendung der Energie der Quelle, die von den Beziehungen an der Grenzfläche hervorgerufen wird. Die zur Grenzfläche senkrecht stehenden Komponenten des Poyntingschen Vektors über und unter der Oberfläche sind allgemein nicht gleich: sie haben vielmehr bei durchsichtigen Medien in jedem Augenblick entgegengesetzten Sinn¹⁾. Die Wirkung der Grenzbedingungen besteht in unserer Darstellung eben darin, daß die primäre Schwingung der Quelle die Differenz im Energiestrom ausgleichen muß. Da wir bisher immer von Erhaltung der Energie gesprochen haben, liegt es nicht so nahe zu verstehen, warum Energie von der Quelle verlangt wird, die nirgends verloren geht. Das Paradoxon ist wahrscheinlich dadurch zu erklären, daß an der Grenzfläche eine Arbeit für die Ablenkung der Energieströme geleistet wird (Erhaltung des Impulses). Die Grenzbedingungen, von denen wir bisher abgesehen haben, sehen nun wie Gesetze der Brechung der Stromlinien aus: wenn diese nicht befriedigt werden, muß Arbeit geleistet werden. Auf diese Begriffe dürfte ich vielleicht nur hindeuten, ohne sie zu verfeinern, da eine konsequente Theorie mit der Maxwell'schen zusammenfallen würde.

In den durchsichtigen Medien sind die obengenannten Verluste sehr groß, da die senkrecht stehenden Komponenten des Poyntingschen Vektors in beiden Medien entgegengesetzte Richtung haben; so daß Quasi-Eigenschwingungen unmöglich sind. In den Metallen werden aber wegen des negativen ϵ (vgl. Anh. I) die Stromlinien in umgekehrtem Sinne durchgelaufen; die senkrecht stehenden Komponenten des Poyntingschen Vektors sind dann in beiden Medien gleichgerichtet und es besteht keine prinzipielle Schwierigkeit, die Grenzbedingungen zu befriedigen, so daß Quasi-Eigenschwingungen gefunden werden. Ohne in Einzelheiten einzugehen, wollen wir noch bemerken, daß man sich durch diese Methode überzeugen kann, daß $n^2 \gamma + \nu$ ein (nicht lineares) Maß für die Energie liefert, die zur Erhaltung der Quasi-Eigenschwingungen nötig ist.

Anhang III:

Die Interferenzeffekte der Dispersionsformel

Die Formel (17) entsteht aus der Interferenz eines langsam veränderlichen Anteils mit einem anderen Anteil, dessen Verlauf durch eine sogenannte „Dispersionsformel“ dargestellt wird. Über die Natur des ersten Anteils wird gar nichts vorausgesetzt: er kann z. B. ebenso die Wirkung von Übergängen erster Ordnung — im Gegensatz zur Deutung der Dispersionsformel als Glied zweiter Ordnung —, wie die gesamte Wirkung von anderen „weiten“ Resonanzerscheinungen darstellen. Diese Formel tritt in sehr verschiedenen Gebieten der Physik auf und enthält den stetigen Übergang zwischen scheinbar verschiedenen Erscheinungen.

1) Das ist eine Folge der entgegengesetzten exponentiellen Dämpfung senkrecht zur Oberfläche.

Wir werden q und φ als Parameter betrachten und dementsprechend $I(\varepsilon)$ zeichnen. Im besonderen Fall, daß $\varphi = -\frac{\pi}{2}$ und $q = 1$ ist, erhält man bei genauer Resonanz ($s = 0$) die vollständige Interferenz der Wellen ($I = 0$); sonst ist I immer positiv. Dann können wir der Einfachheit halber nur den Fall $\varphi = 0$ diskutieren. In der Abb. 9 habe ich $I(\varepsilon)$ für $\varphi = 0$ und für ver-

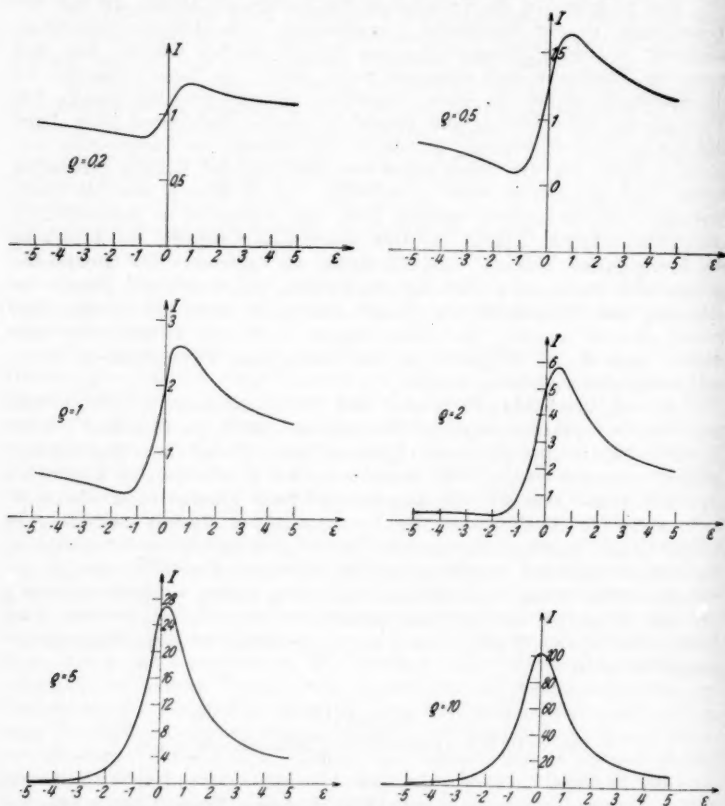


Abb. 9. Verlauf der Funktion $I(\varepsilon)$ nach der Formel (17) für $\varphi = 0$ und verschiedene Werte von q

schiedene Werte von q gezeichnet. Der typische qualitative Zug dieser Kurven ist ihre starke Unsymmetrie, die dadurch zustande kommt, daß die Phase des Interferenzvorgangs der zwei Glieder links und rechts der Resonanz entgegengesetztes Vorzeichen besitzt. Diese Bemerkung stellt natürlich an und für sich nichts Neues dar (die Erscheinung der anomalen optischen Dispersion ist z. B. seit lange wohlbekannt); man darf aber ihre Tragweite vielleicht nochmals hervorheben. Es scheint mir nämlich, daß man oft in der

Deutung von Resonanzerscheinungen nur der Überlagerung der Intensitäten der zwei Arten Übergänge Rechnung trägt, ohne die Folgen der Interferenz nach der Formel (17) zu berücksichtigen. Erst diese Formel gestattet dagegen, wichtige Züge solcher Resonanzerscheinungen zu verstehen. Es passiert nämlich, daß scharfe oder unscharfe Maxima im Verlauf von Intensitätskurven einfach als Resonanzerscheinungen gedeutet werden, indem man annimmt, daß die „Resonanz“ dem Maximum entspricht. Es ist dagegen festzustellen, daß mit Ausnahme der Fälle, in denen das Maximum viel (z. B. 10mal) größer als der Hintergrund ist, eine Resonanz nicht wie ein „Berg“, sondern wie ein System „Mulde-Damm“ aussieht, wo die Resonanz selbst zwischen Mulde und Damm liegt¹⁾. Derartige Umstände sollten auch in der Diskussion der Resonanzerscheinungen in den Kernumwandlungen berücksichtigt werden. Heutzutage sind aber unsere experimentellen und theoretischen Kenntnisse in diesem Gebiet zu klein, um den Verlauf der Resonanzkurven diskutieren zu können: man kennt kaum die Existenz von Resonanzen, über ihre Beschaffenheit gar nichts.

Es liegt nun nahe, auch den Intensitätsverlauf der Spektren des Woodschen Gitters C mit Hilfe unserer Kurven zu deuten; die Kurve für $q = 1$ sieht z. B. wirklich wie eine Photometrie der „hellen Banden“ aus²⁾. Der Nenner $n^2\gamma + \nu$ der optischen Theorie ist nämlich wesentlich mit dem Ausdruck $E - E_n + \frac{i}{2} \Gamma$ gleichwertig (vgl. auch Anh. II).

Vom quantitativen Standpunkt sind vielleicht die folgenden Zahlen bedeutend. Wenn die maximale Übergangswahrscheinlichkeit durch Resonanz 25mal kleiner als die Wahrscheinlichkeit des direkten Übergangs ist, bewirkt die Interferenz ein Maximum und ein Minimum der Intensität, deren Unterschied 40% der mittleren Intensität beträgt. Wenn dagegen der direkte Übergang einen Hintergrund verursacht, dessen Intensität 25mal kleiner als die maximale Intensität der Resonanzlinie ist, ist die Intensität im Abstand $5/2$ Linienbreiten rechts von der Resonanz noch 15% des Maximums, während sie in demselben Abstand links nur 2‰ davon beträgt; ohne Interferenz würde man ebenso rechts wie links 4% erhalten.

Die Idee, die Woodschen Anomalien zu untersuchen und sie weiter mit den Frisch-Sternschen „Dellen“ zu vergleichen, verdanke ich Herrn Prof. Segrè. Nach der Veröffentlichung meiner ersten Notiz haben sich Herr Geh.-Rat Prof. Sommerfeld und Herr Prof. v. Laue in mehreren freundlichen Diskussionen für meine Arbeit interessiert. Ihnen allen möchte ich herzlich danken.

1) Erst mit Hilfe von derartigen Überlegungen habe ich eine etwas eigenartige von Beutler entdeckte Anomalie im Intensitätsverlauf gewisser Absorptionsspektren erklärt; vgl. Nuovo Cimento 11. S. 156. 1935.

2) Vgl. die schematische Abb. 3 und a. a. O., Phys. Rev. 48. S. 929. 1935.

Rom, Istituto Fisico della R. Università, März 1938.

(Eingegangen 9. April 1938)

Erdabsorption bei horizontalen Dipolantennen**Von K. F. Niessen**(Naturkundig Laboratorium der N. V. Philips' Gloeilampenfabrieken
Eindhoven-Holland)

(Mit 1 Abbildung)

Zusammenfassung

Wenn eine horizontale infinitesimale Dipolantenne (Wellenlänge λ) sich in einer Höhe h oberhalb der (eben gedachten) Erdoberfläche befindet, so wird ein Teil T der vom Sender emittierten Totalenergie in der Erde absorbiert, deren Dielektrizitätskonstante ϵ_2 und Leitvermögen σ_2 sein möge. Der Bruch T wird hier berechnet als Funktion von $\alpha = \frac{4\pi h}{\lambda}$ und von ϵ_2 , σ_2 und λ , und zwar berechnet mittels einiger linearen Integrale, die bei gegebener Bodenart, Wellenlänge und Höhe sich leicht graphisch integrieren lassen. Während in früheren Arbeiten anderer Autoren die Berechnung der „Erdabsorption“ oder besser des Quotienten T nur bei der Annahme rein dielektrischer Erde möglich war, gestattet unsere Rechnungsmethode, das endliche Leitvermögen der Erde in Betracht zu ziehen. In einer folgenden Arbeit werden wir das hier erreichte allgemeine Resultat in einigen für die Praxis besonders wichtigen Fällen numerisch verwerten und die bei horizontalen und vertikalen Dipolen in der Erde absorbierten Energien miteinander vergleichen, um bei gegebener Bodenart und Wellenlänge schließen zu können, welcher Stand des Dipols in dieser Hinsicht vorzuziehen ist.

§ 1. Über die Feldkomponenten

Während wir früher¹⁾ den von einer ebenen Erde absorbierten Teil der Strahlung eines vertikalen Dipolenders berechneten, wollen wir jetzt den Fall eines horizontalen Dipolenders betrachten. Die Verhältnisse sind hierbei viel komplizierter wie bei dem vertikalen. Jedoch wird es gelingen, das Doppelintegral, das hier naturgemäß auftritt, in ein einfaches (d. h. lineares) zu transformieren und für

1) K. F. Niessen, Ann. d. Phys. [5] 22. S. 162. 1935; 24. S. 31. 1935 (mit I und II zitiert).

die wirklich in Betracht kommenden Bodenarten und Wellenlängen in eine praktische Form zu bringen.

Bekanntlich hat Sommerfeld¹⁾ die Wellenausbreitung untersucht für den Fall, daß ein vertikaler Dipolsender unmittelbar auf der Erdoberfläche steht, und bald darauf untersuchte sein Schüler H. von Hörschelmann²⁾ dasselbe für die geknickte Antenne, wovon uns hier nur der Einfluß des horizontalen Teiles interessiert.

Nach der Methode von von Hörschelmann kann man nun das elektromagnetische Feld eines horizontalen Dipolsenders³⁾, *jetzt aber oberhalb der Erdoberfläche gedacht*, folgendermaßen aus zwei Hertz-schen Funktionen $P(x, y, z)$ und $\Pi(x, y, z)$ ableiten, wobei im rechtwinkligen Koordinatensystem die z -Achse vertikal steht und die x - und y -Achse in der Erdoberfläche liegen.

Sieht man von Zeitfaktoren ab, so hat man für das magnetische Feld H und für das elektrische Feld E ⁴⁾:

$$\begin{aligned} H_x &= -\frac{j c}{\omega} k^2 \frac{\partial \Pi}{\partial y}, \\ H_y &= -\frac{j c}{\omega} k^2 \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\partial \Pi}{\partial x} \right), \\ H_z &= \frac{j c}{\omega} k^2 \frac{\partial P}{\partial y}, \\ E_x &= k^2 P + \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x \partial z}, \\ E_y &= \frac{\partial^2 P}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial y \partial z}, \\ E_z &= \frac{\partial^2 P}{\partial x \partial z} + k^2 \Pi + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial z^2}, \end{aligned}$$

wobei sowohl $P(x, y, z)$ wie $\Pi(x, y, z)$ für die Luft eine andere Funktion ist wie für die Erde, ebenso wie k^2 für die Luft bzw. für die Erde bedeutet:

$$(1a) \quad k_1^2 = \frac{\epsilon_1 \omega^2 + j \omega \sigma_1}{c^2} = \frac{\omega^2}{c^2},$$

$$(1b) \quad k_2^2 = \frac{\epsilon_2 \omega^2 + j \omega \sigma_2}{c^2}.$$

1) A. Sommerfeld, Ann. d. Phys. 28. S. 665. 1909; 81. S. 1135. 1926.

2) H. von Hörschelmann, Jahrb. drahtl. T. u. T. 5. S. 14. 1912.

3) Die Antennenlänge ist klein in bezug auf die Wellenlänge angenommen, so daß von einem Dipol gesprochen werden kann.

4) Vgl. z. B. Riemann Weber II (Artikel von Sommerfeld über drahtlose Telegraphie).

($\epsilon_{1,2}$ = Dielektrizitätskonstante, $\sigma_{1,2}$ = Leitvermögen, ω = Winkel-
frequenz, $j = \sqrt{-1}$; für nicht-leitende Luft: $\epsilon_1 = 1$, $\sigma_1 = 0$).

Wenn wir die in der Erde absorbierte Strahlung als Teil der
sämtlichen, ursprünglich in die Luft emittierten Strahlung berechnen
wollen, hat es den Anschein, daß sowohl das Feld in der Luft wie
das in der Erde bekannt sein muß. Es wird sich aber ergeben,
(ebenso wie früher bei dem vertikalen Sender), daß wir dank dem
verschwindend kleinen Leitvermögen der Luft ($\sigma_1 = 0$) nur das Feld
in der Luft brauchen.

Werden statt x und y Polarkoordinaten

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x}$$

benutzt, so hat man, wenn

h die Höhe

des Dipols oberhalb der Erdoberfläche ist: *in der Luft oberhalb des
Dipols, also für $z > h$:*

$$(2a) \quad \left\{ \begin{aligned} P_1 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-(z-h)w_1} \frac{J_0(tr) t dt}{w_1} \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-(z+h)w_1} \frac{w_1 - w_2}{w_1} \frac{J_0(tr) t dt}{N'} \end{aligned} \right.$$

$$(2b) \quad \Pi_1 = (k_1^2 - k_2^2) \cos \varphi \int_0^\infty e^{-(z+h)w_1} \frac{J_1(tr) t^2 dt}{N N'}$$

und in der Luft unterhalb des Dipols, also für $0 < z < h$:

$$(3a) \quad \left\{ \begin{aligned} P_1 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-(h-z)w_1} \frac{J_0(tr) t dt}{w_1} \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-(h+z)w_1} \frac{w_1 - w_2}{w_1} \frac{J_0(tr) t dt}{N'} \end{aligned} \right.$$

$$(3b) \quad \Pi_1 = (k_1^2 - k_2^2) \cos \varphi \int_0^\infty e^{-(z+h)w_1} \frac{J_1(tr) t^2 dt}{N N'}$$

wo der Index 1 bei P und Π auf die Luft hinweist und wo:

$$(4) \quad \left\{ \begin{aligned} w_1 &= \sqrt{t^2 - k_1^2}, & w_2 &= \sqrt{t^2 - k_2^2}, \\ N &= k_1^2 w_2 + k_2^2 w_1, & N' &= w_1 + w_2. \end{aligned} \right.$$

Die Wurzeln w_1 und w_2 sind immer so zu ziehen, daß ihr Realteil positiv wird.

Diese, nach dem Ansatz von von Hörschelmann abgeleiteten Formeln findet man auch in Riemann-Weber II. Sie sind basiert auf eine Dipolstärke $1/2$, d. h. wäre keine Erde anwesend (d. h. für $k_2^2 = k_1^2$), so würde das Feld von einer Hertzschen Funktion

$$P_1 = \frac{1}{2} \frac{e^{j k_1 R}}{R} \quad (R = \sqrt{r^2 + z^2})$$

ableitbar sein, ohne Anwesenheit der II -Funktion.

Dieser P -Funktion ist gewissermaßen eine Richtung zuzuschreiben, und zwar die Richtung des Dipols, d. h. hier die x -Achse. Durch die Anwesenheit der Erde wurde die Einführung einer zweiten Hertzschen Funktion notwendig (die II -Funktion), um allen Grenzbedingungen an der Oberfläche genügen zu können. Diese II -Funktion sollte nach von Hörschelmann die Richtung der z -Achse haben. Sie rührt eigentlich von den Vertikalkomponenten der Erdströme her, die zusammen mit den Vertikalströmen in der Luft (vom Dipol nach der Oberfläche und umgekehrt) den Weg vom einen Endpunkte des Dipols zum anderen schließen.

Daß diese II -Funktion nur den Vertikalkomponenten der Erdströme und nicht auch noch den Vertikalkomponenten der Verschiebungsströme in der Luft zu verdanken ist, sieht man deutlich ein, wenn die Erde für einen Moment unendlich gut leitend angenommen wird, d. h. wenn $|k_2^2| = \infty$ gesetzt wird. Nach (2b) und (3b) verschwindet dann die II -Funktion überall in der Luft (ebensogut wie in der Erde), denn für $|k_2^2| = \infty$ wird

$$N(\cdot) |k_2^2|, \\ N(\cdot) w_2(\cdot) |k_2|.$$

Die Erdströme dringen jetzt nicht mehr in die Erde hinein; sie werden jetzt Oberflächenströme. Die Vertikalkomponenten der Erdströme sind also verschwunden, und wie wir sahen, auch die II -Funktion.

Die Verschiebungsströme in der Luft haben noch ihre Vertikalkomponenten beibehalten, aber geben offenbar nicht zu einer Strahlung Anlaß, was übrigens mit der bekannten Tatsache, daß Verschiebungsströme überhaupt nicht strahlen, in Übereinstimmung ist.

Weil P_1 und II_1 nach obigem in Polarkoordinaten bekannt sind, schreiben wir den Zusammenhang zwischen den uns interessierenden Feldkomponenten und beiden Hertzschen Funktionen folgendermaßen:

$$(5) \quad \begin{cases} H_r = -\frac{j c}{\omega} k^2 \frac{1}{r} \frac{\partial \Pi}{\partial \varphi} - \frac{j c}{\omega} k^2 \frac{y}{r} \frac{\partial P}{\partial \xi}, \\ H_\varphi = -\frac{j c}{\omega} k^2 \left(\frac{x}{r} \frac{\partial P}{\partial \xi} - \frac{\partial \Pi}{\partial r} \right), \\ E_r = \frac{x}{r} k^2 P + \frac{x}{r} \frac{\partial^2 P}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial r \partial \xi}, \\ E_\varphi = -\frac{y}{r} k^2 P - \frac{y}{r^2} \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Pi}{\partial \varphi} \right). \end{cases}$$

Da wir später unsere Endformel für den absorbierten Strahlungsteil in speziellen Sonderfällen kontrollieren wollen, unter anderem auch im Falle $k_2^2 = k_1^2$, empfiehlt es sich, schon von Anfang an die Formeln für Π_1 umzubilden. Für $k_2^2 = k_1^2$ wird nämlich

$$\frac{k_1^2 - k_2^2}{N N'} \rightarrow \frac{k_1^2 - k_2^2}{4 k_1^2 (t^2 - k_1^2)}.$$

Die Integrale im Ausdruck für Π_1 würden also im Falle $k_1^2 = k_2^2$ mit Null multipliziert aber wegen $t - k_1$ im Nenner von (2b) und (3b) selber divergieren, da der Punkt $t = k_1$ beim Integrieren von $t = 0$ bis $t = \infty$ passiert wird (k_1 war ja reell).

Deshalb ersetzen wir in (2b) und (3b)

$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{N N'} = \frac{t^2 - k_1^2 - (t^2 - k_2^2)}{N N'} = \frac{w_1 - w_2}{N},$$

so daß der Zähler bei $k_2^2 = k_1^2$ verschwindet und der Nenner

$$N \rightarrow 2 k_1^2 \sqrt{t^2 - k_1^2}$$

nur $\sqrt{t^2 - k_1^2}$ als Faktor also $\sqrt{t - k_1}$ enthält, d. h. nicht mehr zu einem divergierenden Integral führt.

Nach obiger Vorschrift kommt dann für $\xi = h + \varepsilon$ ($\varepsilon \rightarrow 0$) also in einer horizontalen Ebene, unmittelbar oberhalb des Dipols:

$$\boxed{\xi = h + 0}$$

$$\begin{aligned} H_r &= \frac{j c}{\omega} k_1^2 \sin \varphi \left[\frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-\varepsilon \sqrt{t^2 - k_1^2}} J_0(\tau r) \tau d\tau \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty e^{-2 h w_1} (w_1 - w_2) \left(\frac{J_0(\tau r)}{2 N'} - \frac{J_1(\tau r) \tau}{N r} \right) \tau d\tau \right], \\ H_\varphi &= \frac{j c}{\omega} k_1^2 \cos \varphi \left[\frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-\varepsilon \sqrt{t^2 - k_1^2}} J_0(\tau r) \tau d\tau \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty e^{-2 h w_1} (w_1 - w_2) \left(\frac{J_0(\tau r)}{2 N'} + \frac{J_0''(\tau r) \tau^2}{N} \right) \tau d\tau \right], \end{aligned}$$

$$E_r = \cos \varphi \left[\int_0^\infty \frac{k_1^2 J_0(tr) t + J_0''(tr) t^3}{N'} \{ \dots \} dt \right. \\ \left. + \int_0^\infty \frac{J_0''(tr) t^3 e^{-2hw_1}}{N} w_1 (w_2 - w_1) dt \right],$$

$$E_\varphi = -\sin \varphi \left[\int_0^\infty \frac{k_1^2 J_0(tr) tr + J_0'(tr) t^2}{r N'} \{ \dots \} dt \right. \\ \left. - \int_0^\infty \frac{J_1(tr) t^2}{r N} e^{-2hw_1} w_1 (w_2 - w_1) dt \right],$$

wo wir mit $\{ \dots \}$ andeuten:

$$\{ \dots \} = \frac{e^{hw_1} + e^{-hw_1}}{2e^{hw_1}} + \frac{w_2}{w_1} \frac{e^{hw_1} - e^{-hw_1}}{2e^{hw_1}}.$$

Die Integrationsvariable in den Integralen für die H -Komponenten nannten wir τ statt t und verstehen dort unter w_1 und w_2 natürlich $\sqrt{\tau^2 - k_1^2}$ bzw. $\sqrt{\tau^2 - k_2^2}$, während sie in den E -Komponenten $\sqrt{t^2 - k_1^2}$ bzw. $\sqrt{t^2 - k_2^2}$ bedeuteten.

Derartige Gleichungen gelten für $z = h - \varepsilon$ ($\varepsilon \rightarrow 0$), die wir der Einfachheit halber nicht ausgeschrieben haben.

§ 2. Über die Methode zur Berechnung der nach oben sowie der nach unten emittierten Energie

Aus diesen Feldkomponenten kann der Poyntingsche Strahlungsvektor berechnet werden.

Für die Strahlung $\mathfrak{S}_{z=h+0}$, die durch die Ebene $z = h + 0$ (also durch eine horizontale Ebene, die unmittelbar oberhalb des Dipols angebracht wird) nach oben emittiert wird, hat man:

$$(6) \quad \mathfrak{S}_{z=h+0} = \frac{1}{2} \Re \int_0^\infty \int_0^{2\pi} c (E_r \tilde{H}_\varphi - E_\varphi \tilde{H}_r) d\varphi r dr,$$

wobei mit $\Re a$ der Realteil von a und mit \tilde{a} der komplex konjugierte Wert von a angegeben wird.

Bezüglich der Wurzel w_1 und ihres konjugierten Wertes \tilde{w}_1 bemerken wir, daß (wegen der Bemerkung über ihren positiven Realteil)

$$w_1 = -j \sqrt{k_1^2 - t^2} \quad \text{für } t < k_1,$$

$$w_1 = \sqrt{t^2 - k_1^2} \quad \text{,, } t > k_1,$$

$$\tilde{w}_1 = j \sqrt{k_1^2 - \tau^2} \quad \text{,, } \tau < k_1,$$

$$\tilde{w}_1 = \sqrt{\tau^2 - k_1^2} \quad \text{,, } \tau > k_1,$$

Die Integration nach φ kann sofort ausgeführt werden und gibt:

$$\left[\int_0^{2\pi} E_r \tilde{H}_\varphi d\varphi \right]_{\lambda=h+0} = \frac{-jck_1^2\pi}{2\omega} (I_a + I_b + I_c + I_d),$$

$$\left[\int_0^{2\pi} E_\varphi \tilde{H}_r d\varphi \right]_{\lambda=h+0} = \frac{-jck_1^2\pi}{2\omega} (II_a + II_b + II_c + II_d).$$

Die Gruppierung der resultierenden Terme in den Gruppen I_a bis II_d beruht auf folgendem:

Im Produkt eines E - und eines H -Komponenten hat man immer mit Termen zu tun, die als Faktor sowohl ein Integral nach t wie ein Integral nach τ enthalten. Es gibt aber Integrale mit dem Ausdruck $\{\dots\}$ im Integrand und andere mit $w_1 - w_2$ oder $\tilde{w}_1 - \tilde{w}_2$ im Integrand. Diese Integrale wollen wir der Kürze halber andeuten mit:

$$\text{Int. } \{\dots\}, \quad \text{Int. } (w_1 - w_2), \quad \text{Int. } (\tilde{w}_1 - \tilde{w}_2).$$

Wir vereinigen nun:

$$\begin{aligned} &\text{in } I_a \text{ und } II_a \text{ alle Terme mit Int. } \{\dots\} \times \int_0^\infty J_0(\tau r) \tau d\tau, \\ &\text{in } I_b \text{ und } II_b \text{ „ „ „ Int. } \{\dots\} \times \text{Int. } (\tilde{w}_1 - \tilde{w}_2), \\ &\text{in } I_c \text{ und } II_c \text{ „ „ „ Int. } (w_1 - w_2) \times \int_0^\infty J_0(\tau r) \tau d\tau, \\ &\text{in } I_d \text{ und } II_d \text{ „ „ „ Int. } (w_1 - w_2) \times \text{Int. } (\tilde{w}_1 - \tilde{w}_2). \end{aligned}$$

Man bekommt dann für die nach oben emittierte Strahlung:

$$(7a) \quad \mathfrak{S}_{\lambda=h+0} = \frac{c}{2} \Re \int_0^\infty \frac{-jck_1^2\pi}{2\omega} S_+ r dr$$

mit

$$(7b) \quad S_+ = I_a - II_a + I_b - II_b + I_c - II_c + I_d - II_d.$$

Von den in S_+ benötigten Differenzen lassen sich:

$$I_a - II_a = \int_0^\infty \frac{2k_1^2 J_a(t r) t r + J_a''(t r) t^3 r + t^3 J_a'(t r)}{r N'} \{\dots\} dt \int_0^\infty J_0(\tau r) \tau d\tau$$

und

$$I_c - II_c = \int_0^\infty \frac{J_c''(t r) t^3 r + t^3 J_c'(t r)}{r N} e^{-2\lambda w_1} w_1 (w_2 - w_1) dt \int_0^\infty J_0(\tau r) \tau d\tau$$

bei Anwendung der Differentialgleichung

$$J_0''(x) + \frac{1}{x} J_0'(x) + J_0(x) = 0,$$

woraus

$$t^2 J_0''(tr) + \frac{t}{r} J_0'(tr) + t^2 J_0(tr) = 0,$$

umbilden zu:

$$I_a - II_a = \int_0^\infty \frac{2k_1^2 J_0(tr) tr - t^3 r J_0'(tr)}{r N'} \{ \dots \} dt \int_0^\infty J_0(\tau r) \tau d\tau,$$

$$I_c - II_c = - \int_0^\infty \frac{J_0(tr) t^3}{N} e^{-2h w_1} w_1 (w_2 - w_1) dt \int_0^\infty J_0(\tau r) \tau d\tau,$$

d. h. bringen in die Gestalt:

$$\text{Int. } J_0(tr) \times \text{Int. } J_0(\tau r),$$

wo wir mit $\text{Int. } J_0(tr)$ einen Integral andeuten, wo unter anderem $J_0(tr)$ als Faktor im Integrand auftritt.

Dasselbe gelingt aber nicht für die übrigen Differenzen $I_b - II_b$ und $I_d - II_d$.

Nach zweckmäßiger Gruppierung und wiederholter Anwendung der Differentialgleichung für Besselfunktionen sieht man, daß der Ausdruck

$$I_b - II_b + I_d - II_d$$

auf dreierlei Terme führt, nämlich auf

Terme vom Typus	$\text{Int. } J_0(tr) \times \text{Int. } J_0(\tau r),$
" " "	$\text{Int. } J_0'(tr) \times \text{Int. } J_0'(\tau r),$
" " "	$\text{Int. } J_0''(tr) \times \text{Int. } J_0''(\tau r),$

so daß der Ausdruck (7b) für S_+ aus diesen drei Termtypen aufgebaut werden kann.

Diese enthalten sowohl ein t Integral wie ein τ -Integral. Das t -Integral rührte vom elektrischen Feld E , das τ -Integral von H her.

Nun müssen wir nach (7a) berechnen

$$\mathfrak{S}_{\pm h+0} = \frac{1}{2} \Re \frac{-j c^2 k_1^2 \pi}{2 a_s} \int_0^\infty S_+ r dr,$$

so daß wir es hier mit dreifachen Integralen $\int \int \int \dots dt d\tau dr$ zu tun haben.

Wir werden die r -Integration zuerst ausführen und stoßen dann auf drei verschiedene r -Integrale:

$$(8a) \quad i_1 = \int_0^{\infty} J_0(tr) J_0(\tau r) r dr,$$

$$(8b) \quad i_2 = \int_0^{\infty} J_0''(tr) J_0''(\tau r) r dr,$$

$$(8c) \quad i_3 = \int_0^{\infty} \frac{J_0'(tr) J_0'(\tau r)}{r} dr.$$

Zur Berechnung von i_1 benutzen wir¹⁾

$$\int_0^{\infty} \varrho J_0(\alpha \varrho) J_0(\varrho) d\varrho = 2\delta(\alpha^2 - 1),$$

was mit

$$\alpha = \frac{\tau}{t} \quad \text{und} \quad \varrho = tr$$

sofort liefert:

$$(9) \quad i_1 = \frac{2}{t^2} \delta\left(\frac{\tau^2}{t^2} - 1\right),$$

wobei $\delta(x)$ die Diracfunktion ist.

Zur Berechnung von i_3 bedenken wir, daß

$$J_0'(tr) = -J_1(tr)$$

und daß²⁾

$$\int_0^{\infty} \frac{J_n(at) J_n(bt)}{t} dt = \begin{cases} \frac{1}{2n} \left(\frac{a}{b}\right)^n & \text{wenn } a < b, \\ \frac{1}{2n} \left(\frac{b}{a}\right)^n & \text{wenn } b < a, \end{cases}$$

woraus sich ergibt:

$$(10) \quad i_3 = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{t}{\tau} & \text{wenn } t < \tau, \\ \frac{1}{2} \frac{\tau}{t} & \text{wenn } \tau < t. \end{cases}$$

Die Berechnung von i_2 ist etwas komplizierter: Wir fangen dazu an mit²⁾:

$$\int_0^{\infty} \frac{J_1(tr) J_1(\tau r)}{r} dr = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{t}{\tau} & \text{wenn } t < \tau \\ \frac{1}{2} \frac{\tau}{t} & \text{wenn } \tau < t \end{cases} F(t, \tau),$$

wobei wir die im rechten Glied definierte Funktion $F(t, \tau)$ nennen, womit das gewünschte Integral i_2 folgendermaßen zusammenhängt:

1) Vgl. z. B. Balth. v. d. Pol u. K. F. Niessen, *Phil. Mag.* **13**. S. 560. 1932.

2) Vgl. z. B. Balth. v. d. Pol u. K. F. Niessen, *Phil. Mag.* **11**. S. 375. 1931.

$$i_2 = \int_0^\infty J_0''(tr) J_0''(\tau r) r dr = \int_0^\infty J_1'(tr) J_1'(\tau r) r dr$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial t \partial \tau} \int_0^\infty \frac{J_1(tr) J_1(\tau r)}{r} dr = \frac{\partial^2}{\partial t \partial \tau} F(t, \tau),$$

so daß

$$(11) \quad i_2 = \begin{cases} -\frac{1}{2t^2} & \text{wenn } \tau > t, \\ -\frac{1}{2\tau^2} & \text{wenn } t > \tau. \end{cases}$$

Hiermit sind also alle r -Integrationen ausgeführt, die in den soeben erwähnten dreifachen Integralen $\iiint \dots dt d\tau dr$ von $\int_0^\infty S_+ r dr$ benötigt waren.

In den restierenden Doppelintegralen $\iint \dots dt d\tau$ werden wir die τ -Integration am ersten ausführen.

Hat man soeben bei der r -Integration den Wert von i_1 zu benutzen gehabt, so ist die Diracfunktion $\delta\left(\frac{r^2}{t^2} - 1\right)$ aufgetreten und kann man bei der τ -Integration anwenden¹⁾:

$$\int_{\tau=0}^{\tau=\infty} \delta\left(\frac{r^2}{t^2} - 1\right) 2 \frac{r dr}{t^2} = 1,$$

während überall weiter im betreffenden Term S_+ die Variable $\tau = t$ gesetzt werden darf, so daß dort schließlich ein einziges Integral nach t von 0 bis ∞ übrig bleibt.

Obiges war also der Fall bei allen Termen in S_+ vom Typus $\text{Int. } J_0(tr) \times \text{Int. } J_0(\tau r)$.

In den anderen Termen von $\int_0^\infty S_+ r dr$ aber, wo die r -Integration mittels i_2 oder i_3 zu geschehen hat, deren Wert verschieden war, je nachdem $t > \tau$ oder $\tau > t$ ist, muß man zuerst jedes Doppelintegral $\int_0^\infty \int_0^\infty \dots dt d\tau$ in zwei andere zerlegen, wo entweder $t > \tau$ oder $\tau > t$ ist. Nur dann kann man in den neuen dreifachen Integralen $\iiint \dots dt d\tau dr$ die r -Integration nach (11) oder (10)

1) Vgl. I, S. 168.

ausführen, wonach Doppelintegrale nach t und τ übrig bleiben. Die sämtlichen Doppelintegrale, die so in $\int_0^\infty S_+ r dr$ auftreten, heben einander auf, so daß nur lineare Integrale (entstanden nach einer Anwendung der Formel für i_1) übrig bleiben.

Nachdem wir noch zur Anwendung der Vorschrift (7a), die wegen reeller k_1^2 auch lautet:

$$\mathfrak{S}_{\delta=h+0} = -\frac{j c^2 k_1^2 \pi}{4 \omega} \mathfrak{I} \int_0^\infty S_+ r dr,$$

(\mathfrak{I} bedeutet „Imaginärer Teil von“)

den Imaginärteil des berechneten Integrals gewonnen haben, wollen wir auch $\mathfrak{S}_{\delta=h-0}$ berechnen, d. h. die resultierende Strahlung durch eine horizontale Ebene, die unmittelbar unter dem Dipol angebracht wird, wobei Strahlung nach unten positiv gerechnet wird.

Da die Luft als nicht-leitend ($\sigma_1 = 0$) angenommen wurde enthält $\mathfrak{S}_{\delta=h-0}$ also die unmittelbar vom Sender nach unten emittierte Strahlung, vermindert um die von der Erde reflektierte Energie. $\mathfrak{S}_{\delta=h-0}$ ist also zu gleicher Zeit die von der Erde absorbierte Energie.

Während in (7a) bei der Berechnung von $\mathfrak{S}_{\delta=h+0}$ die Feldstärkekomponenten aus den für $z > h$ gültigen Formeln für die Hertzischen Funktionen Π_1 und P_1 zu bestimmen waren, müssen wir zur Berechnung von $\mathfrak{S}_{\delta=h-0}$ mittels derselben Gl. (5) die Felder aber aus den für $z < h$ angegebenen Hertzischen Funktionen (3a) und (3b) ableiten.

Noch ein anderer Unterschied soll betrachtet werden: die positive Richtung für $\mathfrak{S}_{\delta=h+0}$ war nach oben, die für $\mathfrak{S}_{\delta=h-0}$ nach unten gerichtet, deshalb müssen wir im Gegensatz zu (6) schreiben:

$$\mathfrak{S}_{\delta=h-0} = \frac{1}{2} \Re \int_0^\infty \int_0^{2\pi} c (E_\varphi \tilde{H}_r - E_r \tilde{H}_\varphi) d\varphi r dr,$$

deren Berechnung in analoger Weise wie die von $\mathfrak{S}_{\delta=h+0}$ möglich ist. Bequemer ist es aber, von dem schon berechneten Wert von $\mathfrak{S}_{\delta=h+0}$ Gebrauch zu machen. Es zeigt sich nämlich, daß

$$\mathfrak{S}_{\delta=h+0} + \mathfrak{S}_{\delta=h-0} = \frac{-j c^2 k_1^2 \pi}{2 \omega} \mathfrak{I} \int_0^\infty \{I_a - II_a + I_c - II_c\} r dr,$$

deren Bestandteile $I_a - II_a$ und $I_c - II_c$ wir schon bei der Berechnung von $\mathfrak{S}_{\delta=h+0}$ begegneten. Die Rechnungsweise ist der vorigen analog, wonach schließlich sowohl $\mathfrak{S}_{\delta=h+0}$ wie $\mathfrak{S}_{\delta=h-0}$ bekannt sind.

§ 3. Über die in der Erde absorbierte Energie als Teil (T) der sämtlich nach oben und unten emittierten Strahlung

Für diesen Teil T erhalten wir dann in der angedeuteten Weise schließlich als strenges Resultat:

$$(13) \quad T = \frac{\mathfrak{E}_h = h - 0}{\mathfrak{E}_h = h - 0 + \mathfrak{E}_h = h + 0} = 1 - \frac{P + Q}{U + V}$$

mit

$$P = \frac{1}{2} \int_0^1 (1 + u^2) [1 + \varrho'^2 + \sigma'^2 - 2(1 - u^2)(\varrho^* \varrho' + \sigma^* \sigma')] - 2 \sin \alpha u \{ \sigma' - (1 - u^2) \sigma^* \} + 2 \cos \alpha u \{ \varrho' - (1 - u^2) \varrho^* \}] du,$$

$$Q = \int_0^\infty (1 + u^2)^2 [e^{-\alpha u} \sigma^{**} + e^{-2\alpha u} (\sigma^{**} \varrho'' - \sigma'' \varrho^{**})] du,$$

$$U = \int_0^1 [1 + u^2 - \sin \alpha u \{ (1 + u^2) \sigma' - 2u^2 (1 - u^2) \sigma^* \} + \cos \alpha u \{ (1 + u^2) \varrho' - 2u^2 (1 - u^2) \varrho^* \}] du,$$

$$V = \int_0^\infty e^{-\alpha u} [(1 - u^2) \sigma'' + 2u^2 (1 + u^2) \sigma^{**}] du,$$

wobei noch

$$2h k_1 = \frac{4\pi h}{\lambda} = \alpha$$

gesetzt wurde.

Die hier auftretenden reellen und dimensionslosen Größen ϱ^* bis σ'' sind als Funktionen von u aus folgendem erhältlich:

$$(14) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\frac{u - jw}{k_2^2} u + jw}{k_1^2} = \varrho^* + j\sigma^*, \\ \frac{\frac{u - w'}{k_2^2} u + w'}{k_1^2} = \varrho^{**} + j\sigma^{**}, \\ \frac{u - jw}{u + jw} = \varrho' + j\sigma', \\ \frac{u - w'}{u + w'} = \varrho'' + j\sigma'', \end{array} \right.$$

wo die Wurzeln

$$(15) \quad \left\{ \begin{array}{l} w = \sqrt{1 - u^2 - \frac{k_2^2}{k_1^2}} \quad (0 < u < 1), \\ w' = \sqrt{1 + u^2 - \frac{k_2^2}{k_1^2}} \quad (0 < u < \infty) \end{array} \right.$$

jedesmal so zu ziehen sind, daß ihre Realteile positiv werden.

Zuerst wollen wir aber noch zwei Kontrollen ausführen, die auf der Hand liegen:

1. Der Sonderfall $k_2^2 = k_1^2$, wo es sich handelt um einen Dipol (wie immer von der Stärke $1/2$) ganz in der Luft, ohne Anwesenheit von irgend etwas anderem als Luft. Hier kann dann selbstverständlich nicht von dem Energieteil gesprochen werden, der *in der Erde* absorbiert wird, sondern bleibt T interpretiert als Bruchteil der Gesamtstrahlung, der nach unten geht, so daß hier $T = \frac{1}{2}$ zu erwarten ist.

2. Der Sonderfall $\sigma_2 = \infty$, d. h. der Fall einer unendlich gut leitenden Erde, wo überhaupt kein Feld in die Erde eindringen kann, so daß hier $T = 0$ werden muß.

Da k_2^2/k_1^2 im allgemeinen eine komplexe Größe aus dem ersten Quadranten ist, hat man hier

$$\frac{k_2^2}{k_1^2} = 1 + j\delta \quad (0 < \delta \rightarrow 0)$$

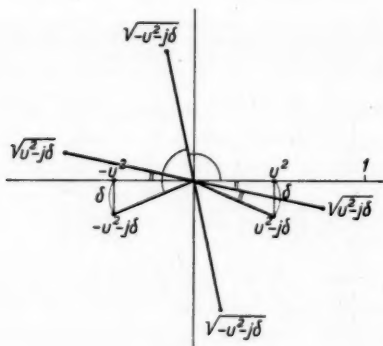


Abb. 1

anzunehmen, wodurch

$$1 - u^2 - \frac{k_2^2}{k_1^2} = -u^2 - j\delta \rightarrow -u^2,$$

$$1 + u^2 - \frac{k_2^2}{k_1^2} = u^2 - j\delta \rightarrow u^2.$$

Zur Berechnung von w und w' müssen wir von den Wurzeln

$$\sqrt{1 - u^2 - \frac{k_2^2}{k_1^2}} \rightarrow \pm j u,$$

$$\sqrt{1 + u^2 - \frac{k_2^2}{k_1^2}} \rightarrow \pm u$$

nur diejenigen auswählen, deren Realteil positiv ist (oder durch positive Werte hindurch den Nullwert erreicht hat). Abb. 1 zeigt also, daß hier

$$w = -j u,$$

$$w' = u$$

zu nehmen ist.

Durch Substitution dieser Werte in (14) verschwinden alle Funktionen ϱ^* bis σ'' , so daß in (13)

$$Q = 0, \quad V = 0, \quad P = \frac{1}{2} U$$

wird und die T -Formel schließlich gibt

$$T = \frac{1}{2}.$$

Zweite Kontrolle

In den Ausdrücken für P und U geht u von 0 bis 1 und in Q und V von 0 bis ∞ , aber wegen des Faktors e^{-au} in den letzten Ausdrücken brauchen wir überall nur endliche u -Werte zu betrachten. Bei $\left| \frac{k_2^2}{k_1^2} \right| = \infty$ hat man also:

$$\left| \frac{k_2^2}{k_1^2} \right| \gg \frac{|w|}{|w'|} \text{ oder } \gg u,$$

denn $|w|$ und $|w'|$ sind nach (15) von der Ordnung $\sqrt{\left| \frac{k_2^2}{k_1^2} \right|}$. Daraus folgt sofort nach (14)

$$\varrho^* = \sigma^* = \varrho^{**} = \sigma^{**} = \sigma' = \sigma'' = 0,$$

$$\varrho' = \varrho'' = -1,$$

so daß wir in die T -Formel zu substituieren haben:

$$P = U = \int_0^1 (1 + u^2)(1 - \cos au) du,$$

$$Q = V = 0,$$

woraus

$$T = 0.$$

Zusammenfassend bemerken wir, daß zur Berechnung der nach oben und unten emittierten Strahlung hier (ebenso wie früher beim vertikalen Sender) nur exakte Ausdrücke für die Feldkomponenten benutzt worden sind, was notwendig war, damit wir den Poyntingstrom durch Ebenen integrieren konnten, die den Dipol unmittelbar (oberhalb oder unterhalb) passierten.

In der üblichen Weise, wo man zur Berechnung der Strahlung die Feldkomponenten nur auf großen Abstand berechnet, kann die endliche Leitfähigkeit der Erde nicht berücksichtigt werden, denn im Unendlichen der Erde sind dann immer die Feldkomponenten verschwunden, wiewohl die Erde doch Energie vom Sender empfangen hat, so daß das Verhältnis T der nach unten und oben emittierten Energie sich in der üblichen Weise nicht berechnen ließ.

Für die numerischen Anwendungen werden wir (in einer folgenden Arbeit) das oben erwähnte allgemeine Resultat noch etwas anders schreiben.

Eindhoven, 1. Oktober 1937.

(Eingegangen 29. März 1938)

Leitfähigkeit und Dielektrizitätskonstante einer Elektronenströmung

Von H. E. Hollmann und A. Thoma

(Mit 1 Abbildung)

Für die Leitfähigkeit und für die Änderung der Dielektrizitätskonstante eines elektronendurchflossenen Kondensators hat Benner die Beziehungen abgeleitet¹⁾:

$$\sigma = \frac{N e^2}{m \omega^2 \vartheta} (1 - \cos \omega \vartheta)$$

und:

$$\Delta \varepsilon = - \frac{4 \pi N e^2}{m \omega^2} \left(1 - \frac{\sin \omega \vartheta}{\omega \vartheta} \right),$$

wobei N die Dichte der Elektronenströmung je Kubikzentimeter, ω die Kreisfrequenz der an den Kondensatorplatten liegenden Wechselspannung und ϑ die Verweilzeit der Elektronen zwischen den Platten bedeutet. Dabei setzt Benner voraus, daß die Kondensatorplatten einander so nahe stehen, daß man die über die Platten hinausgreifenden Streufelder vernachlässigen kann. Nun ist diese Vernachlässigung zwar näherungsweise zulässig, wenn die Ablenkung der Elektronen, nicht aber wenn die Energieverhältnisse behandelt werden, weil sie die Rückführung der das Kondensatorfeld auf höheren Niveauflächen verlassenden Elektronen auf das ursprüngliche Eintrittspotential außer Acht läßt²⁾. Dies wird ersichtlich, wenn man in dem Benner'schen Ausdruck für σ die Frequenz ω gegen Null gehen läßt:

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma &= \frac{N e^2}{m} \frac{1 - \cos \omega \vartheta}{\omega^2 \vartheta} \\ &= \frac{N e^2 \vartheta}{2 m}. \end{aligned}$$

Das ergibt für statische Verhältnisse, d. h. wenn zwischen den Kondensatorplatten eine Gleichspannung liegt, eine endliche Leitfähigkeit oder einen endlichen Widerstand, was dem Energiesatz widerspricht.

An anderer Stelle haben wir für den Strom, welcher zwischen den Platten eines elektronendurchflossenen Kondensators übergeht, die Formel abgeleitet³⁾:

$$(1) \quad I_{\text{trans.}} = \frac{I_0}{d} \frac{e}{m} \frac{\mathfrak{E} e^{i \omega t}}{(i \omega)^2} [i \varphi - 2 + (i \varphi + 2) e^{-i \varphi}]$$

worin:

I_0 den Strahlstrom,

d den Plattenabstand,

\mathcal{E} die Amplitude der Feldstärke zwischen den Platten und

$\vartheta = \omega \vartheta$ den Laufzeitwinkel

bedeutet. Kürzlich hat Recknagel die vorstehende Gl. (1) bestätigt gefunden⁴⁾ und hat damit den Nachweis erbracht, daß unsere Rechnung die Rückführung der Austrittselektronen auf ihr Anfangspotential in einem unendlich kurz zusammengedrückten austrittsseitigen Streufeld mit unendlich hohem Feldgradienten enthält. Inzwischen haben wir unsere Rechnung auch auf den Fall ausgedehnt, daß das homogene Feld zwischen den Platten beiderseits durch über die Plattenränder hinausgreifende Streufelder begrenzt wird und sind bis auf eine von den Streufeldern abhängige Änderung der Verweilzeit ϑ wieder zu der obigen ultradynamischen Stromformel gelangt⁵⁾.

Um die durch unsere Inversionstheorie bedingte Leitfähigkeit und Dielektrizitätskonstante einer Elektronenströmung zu berechnen, gehen wir von der Maxwellschen Gleichung für die Dichte des Leitungs- und Verschiebungsstromes aus:

$$(2) \quad j = \frac{e}{4\pi} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \sigma \mathcal{E}.$$

Entsprechend muß auch in Formel (1) auf die Dichte des transversalen Influenzstroms zurückgegangen werden, d. h. $I_{\text{trans.}}$ ist durch die Plattenfläche P zu dividieren:

$$j_{\text{trans.}} = \frac{I_{\text{trans.}}}{P} = \frac{I_0}{V} \frac{e}{m} \frac{\mathcal{E} e^{i\omega t}}{(i\omega)^2} [\dots],$$

wenn mit V das Volumen des Kondensatorfeldes bezeichnet wird. Bedeutet n die Zahl der in das Feld sekundlich eintretenden Elektronen, so gilt für I_0 :

$$I_0 = n \cdot e.$$

Andererseits ist die Elektronendichte je Kubikzentimeter aber:

$$N = \frac{n}{v_0 Q},$$

wenn v_0 die Strahlgeschwindigkeit und Q den zur Strahlrichtung senkrechten Querschnitt durch das Feld darstellt. Infolgedessen erhält man:

$$\frac{I_0}{V} = \frac{Ne}{\vartheta}$$

und damit nimmt Gl. (1) schließlich die Form an:

$$(3) \quad j_{\text{trans.}} = \frac{N e^2}{m \vartheta} \frac{\mathcal{E} e^{i \omega t}}{(i \omega)^2} [i \varphi - 2 + (i \varphi + 2) e^{-i \varphi}].$$

Durch Gleichsetzen von (2) und (3) findet man:

$$(4) \quad \sigma = \frac{N e^2 \vartheta}{m} \frac{\sin \frac{\varphi}{2} - \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2}}{\left(\frac{\varphi}{2}\right)^2} \cdot \sin \frac{\varphi}{2}$$

und:

$$(5) \quad \Delta \varepsilon = \frac{2 \pi N e^2 \vartheta^2}{m} \frac{\sin \frac{\varphi}{2} - \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2}}{\left(\frac{\varphi}{2}\right)^2} \cdot \cos \frac{\varphi}{2}.$$

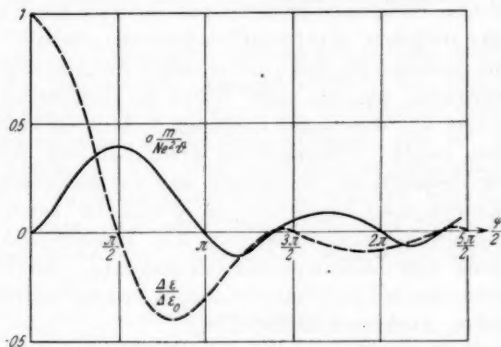


Abb. 1. Leitfähigkeit und Dielektrizitätskonstante einer Elektronenströmung in Abhängigkeit vom halben Laufzeitwinkel

In der ausgezogenen Kurve der Abb. 1 ist der durch Gl. (4) gegebene Verlauf von $\sigma \frac{m}{N e^2 \vartheta}$ in Abhängigkeit vom halben Laufzeitwinkel aufgetragen. Im Gegensatz zu Benner geht die Kurve bei $\omega = 0$ durch Null, wie es der Energiesatz verlangt. Aus Gl. (5) erhält man durch Entwicklung von ω gegen Null:

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \Delta \varepsilon &= \frac{2 \pi}{3} \frac{N e^2 \vartheta^2}{m} \\ &= \Delta \varepsilon_0. \end{aligned}$$

Führt man diesen Ausdruck in Gl. (5) ein, so erhält man den Frequenzgang der Änderung von ε in einer Elektronenströmung bestimmter Dichte und in einem gegebenen Kondensator zu:

$$(6) \quad \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta \varepsilon_0} = \frac{3 \cos \frac{\varphi}{2}}{\left(\frac{\varphi}{2}\right)^2} \left[\sin \frac{\varphi}{2} - \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} \right].$$

Die entsprechende Funktion ist in der gestrichelten Kurve der Abb. 1 dargestellt.

Da die Gl. (1) nicht nur die reine Quersteuerung, sondern, wie wir im Rahmen unserer Inversionstheorie nachgewiesen haben, auch die Längssteuerung erfaßt, gelten Gl. (4) und (5) auch für die Leitfähigkeit und Dielektrizitätskonstante einer längsgesteuerten Elektronenströmung, freilich ohne Berücksichtigung der Raumladung.

Nach Abb. 1 kann die ultradynamische Leitfähigkeit einer Elektronenströmung positiv und negativ werden. Das besagt, daß der Widerstand zwischen den Platten eines Kondensators invertiert, gleichgültig, in welcher Richtung der Kondensator von den Elektronen durchsetzt wird, denn es kommt lediglich darauf an, daß fortwährend neue Elektronen eintreten und ihn nach einer bestimmten Zeit θ wieder verlassen. Grundsätzlich bedeuten also die Inversionen von σ nichts anderes, als daß jede beliebige Elektronenströmung in einem Kondensator oder in einer Röhre bei bestimmten Laufzeitwinkeln Energie aus dem angeschlossenen Außenkreis aufnimmt oder an denselben abgibt. Während der erste Fall die Wirkung der Resonanzbeschleuniger zur Erzeugung sehr energiereicher Ladungsträger (Zyklotron usw.) beschreibt, entspricht der zweite Fall den ultradynamischen Resonanzverzögerern, d. h. sämtlichen Generatoren zur Erzeugung sehr hochfrequenter Schwingungen, deren Verhalten im wesentlichen durch Laufzeitercheinungen bedingt wird (Magnetron, Bremsfeldröhre, Auskoppelgenerator usw.).

Nach Gl. (5) kann auch die Änderung der Dielektrizitätskonstante in Abhängigkeit von der Frequenz und der Elektronenverweilzeit positiv oder negativ und damit die Dielektrizitätskonstante ϵ eines elektronendurchflossenen Kondensators selbst: $\epsilon = 1 + \Delta\epsilon$ größer oder kleiner als Eins werden, was sich daraus erklärt, daß der Influenzstrom nicht wie bei einer reellen Kapazität um $\pi/2$, sondern um beliebig große Phasenwinkel verschoben sein kann. Allerdings führt der an sich naheliegende Gedanke, daß $\Delta\epsilon$ unter geeigneten Verhältnissen, vor allen Dingen bei genügend großer Elektronendichte gleich oder kleiner als -1 werden kann, wodurch ϵ selbst zu Null oder sogar negativ würde, zu einem Trugschluß, weil die obigen Ansätze ihre Gültigkeit verlieren⁶⁾. Um dies zu zeigen, betrachten wir z. B. das erste Inversionsoptimum der Funktion $\Delta\epsilon/\Delta\epsilon_0$ in Abb. 1, das sich bei einem Laufzeitwinkel $\varphi = 1,6\pi$ zu $-0,4$ ergibt. Um in diesem Fall ein $\Delta\epsilon$ von -1 zu erreichen, ist nach Gl. (6) eine Elektronendichte von

$$N = \frac{1,46}{\pi^3} \frac{m \omega^3}{e^3}$$

erforderlich. Schreibt man diese Beziehung in der Form:

$$\omega = 2,15 e \sqrt{\frac{\pi N}{m}},$$

so erkennt man, daß man sich bereits in einem Gebiet befindet, in dem *Plasmaschwingungen* auftreten, deren Frequenz sich bekanntlich zu:

$$\omega = 2 e \sqrt{\frac{\pi N}{m}}$$

errechnet⁷⁾. Es ist klar, daß man von dieser Eigenfrequenz des Elektronengases hinreichend weit entfernt bleiben muß, wenn die Elektronen die der obigen Stromformel (1) zugrunde gelegte und nur durch das Quersfeld bedingte Transversalbewegung ausführen sollen.

Sowohl bei Längsteuerung als auch bei Quersteuerung sind die theoretisch geforderten „Resonanzeffekte“ der Dielektrizitätskonstanten sowie Werte, die je nach der Elektronendichte, den angelegten Platten- oder Elektrodenspannungen und der Frequenz größer oder kleiner als Eins sind, tatsächlich verschiedentlich beobachtet worden⁸⁾. Eine Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie ist indessen erst auf Grund eingehender Versuche, welche den theoretisch geforderten Verhältnissen weitgehend angepaßt sind, zu erwarten.

Zusammenfassung

Aus der Inversionstheorie werden mit Hilfe der Maxwellschen Gleichung für den Gesamtstrom neue Formeln für die Leitfähigkeit und Dielektrizitätskonstante einer Elektronenströmung abgeleitet, die beide Größen in Abhängigkeit vom ultradynamischen Laufzeitwinkel positiv oder negativ bzw. größer oder kleiner als Eins ergeben und die an die Stelle der Bennerschen Formeln treten. Es wird nachgewiesen, daß eine Dielektrizitätskonstante von Null oder mit negativen Vorzeichen nicht zu erreichen ist, weil man in ein Gebiet kommt, in dem die Elektronen Plasmaschwingungen ausführen, wodurch die theoretischen Ansätze ihre Gültigkeit verlieren.

Schrifttum

- 1) S. Benner, Ann. d. Phys. [5] **3**. S. 993. 1929.
- 2) F. W. Gundlach, Ztschr. f. Hochfr. und El. Akustik **50**. S. 65. 1937; E. Brüche u. A. Recknagel, ebenda S. 203.
- 3) H. E. Hollmann u. A. Thoma, Ztschr. f. Hochfr. und El. Akustik **49**. S. 109 (I) und S. 145 (II). 1937; **50**. S. 204. 1937.

- 4) A. Recknagel, Ztschr. f. techn. Phys. **19**. S. 74. 1938.
- 5) H. E. Hollmann u. A. Thoma, erscheint in Ztschr. f. Hochfr. und El. Akustik.
- 6) A. v. Engel u. M. Steenbeck, Elektr. Gasentladungen Berlin 1932. Bd. 1. S. 161.
- 7) L. Tonks u. J. Langmuir, Phys. Rev. **33**. S. 195. 1929; M. Steenbeck, Ztschr. f. Phys. **76**. S. 260. 1932; E. Gerber, Ann. d. Phys. [5] **20**. S. 529. 1934.
- 8) L. Bergmann u. W. Düring, Ann. d. Phys. [5] **1**. S. 1041. 1929; S. K. Mitra u. B. Ch. Sil, Phil. Mag. **13**. S. 1081. 1932; B. Ch. Sil, Phil. Mag. **16**. S. 1114. 1933; E. Muhrer, Ztschr. f. Hochfr. und El. Akustik **43**. S. 1. 1934; A. Imam u. S. R. Khastgir, Indian Journ. of Phys. **11**. S. 37. 1937; S. P. Prasad u. M. N. Verma; Ztschr. f. Phys. **99**. S. 552. 1936; **107**. S. 441. 1937.

Berlin-Lichterfelde, Laboratorium für Hochfrequenztechnik
und Elektromedizin.

(Eingegangen 6. Mai 1938)

Über die Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls ferromagnetischer Substanzen

Von W. Döring

(Mit 1 Abbildung)

Der Elastizitätsmodul ferromagnetischer Materialien hat in Abhängigkeit von der Temperatur unterhalb des Curiepunktes einen anomalen Verlauf. Diese Anomalie wurde von Kersten¹⁾ erstmalig gedeutet. Sie steht im engsten Zusammenhang mit der Erscheinung, daß der Elastizitätsmodul der Ferromagnetika beim Magnetisieren zunimmt. Dieser sogenannte ΔE -Effekt kommt nach Kersten in folgender Weise zustande: Eine Zugspannung bewirkt in einem pauschal unmagnetischen Ferromagnetikum wegen des Vorhandenseins der Magnetostriktion eine Richtungsänderung der spontanen Magnetisierung, und mit dieser ist eine zusätzliche magnetostriktive Dehnung verbunden, die zu der gewöhnlichen elastischen Dehnung hinzukommt. Infolgedessen ist im Felde Null die gesamte Dehnung größer, der Elastizitätsmodul also kleiner als in einem starken Magnetfeld, in dem die Magnetisierungsvektoren festgehalten werden. Der normale Wert des Elastizitätsmoduls ist demnach derjenige, den man im magnetisch gesättigten Zustande mißt, während der Elastizitätsmodul im entmagnetisierten Zustande infolge der zusätzlichen Magnetostriktionsdehnung herabgesetzt erscheint um einen gewissen Betrag, der um so größer ist, je kleiner die inneren Spannungen sind. Wenn das Entstehen der spontanen Magnetisierung beim Abkühlen unter den Curiepunkt außer diesem ΔE -Effekt keinen weiteren Einfluß auf den Elastizitätsmodul hat, sollte demnach der Elastizitätsmodul im magnetisch gesättigten Zustande keine Anomalie am Curiepunkt aufweisen, sondern einen glatten Verlauf in Abhängigkeit von der Temperatur zeigen.

Das ist in der Tat bei den meisten Materialien der Fall, wie die Messungen von S. Siegel und S. L. Quimby²⁾, sowie von O. Engler³⁾ beweisen. Jedoch fand O. Engler, daß bei einer Eisen-Nickel-Legierung mit 42% Ni dies nicht erfüllt ist. Nach-

1) M. Kersten, Ztschr. f. Phys. 85. S. 708. 1933.

2) S. Siegel u. S. L. Quimby, Phys. Rev. 49. S. 663. 1936.

3) O. Engler, Ann. d. Phys. [5] 31. S. 145. 1938.

stehende Abbildung gibt die Meßergebnisse von O. Engler an dieser Legierung wieder. Bei $H = 575$ Oe ist dieses Material bereits vollständig gesättigt. Wie man sieht, tritt hier auch bei dem Elastizitätsmodul im magnetisch gesättigten Zustande am Curiepunkt im Temperaturverlauf ein Knick auf. Bei diesem Material muß also

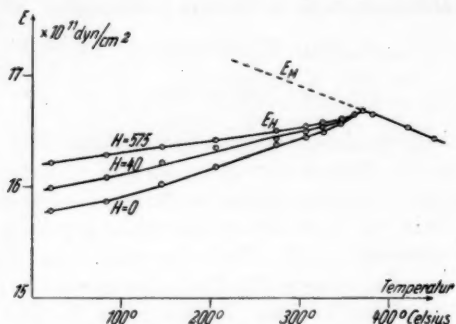


Abb. 1. Der Elastizitätsmodul der Fe-Ni-Legierung mit 42% Ni bei verschiedenen Feldstärken in Abhängigkeit von der Temperatur H in Oersted

das Entstehen der spontanen Magnetisierung noch einen anderen Einfluß auf den Elastizitätsmodul haben, außer dem besprochenen ΔE -Effekt.

In dieser Arbeit soll nun gezeigt werden, daß diese besondere Anomalie der Legierung mit 42% Ni wahrscheinlich als eine Folge der Volumenmagnetostriktion gedeutet werden kann, die ja bei dieser Legierung besonders groß ist. Nach Messungen von Masiyama¹⁾ ist sie bei 40% Ni rund 10mal größer als bei reinem Eisen und 60mal größer als bei Nickel. Wenn wie in diesem Falle auch noch im magnetisch gesättigten Zustande eine starke Zunahme des Volumens mit dem Felde auftritt, so bedeutet das bekanntlich, daß der Betrag der spontanen Magnetisierung empfindlich von der Gitterkonstanten abhängig ist und durch einen allseitigen Druck oder auch durch eine Zugspannung merklich beeinflusst werden kann. Bei einem solchen Material tritt also unter Zug nicht nur eine Änderung der Richtung der spontanen Magnetisierung auf, sondern auch eine Änderung des Betrages, und auch damit ist eine zusätzliche Dehnung verbunden. Diese kann jedoch, zum Unterschied von derjenigen beim gewöhnlichen ΔE -Effekt, durch ein

1) Y. Masiyama, Sc. Rep. Toh. Univ. 20. S. 574. 1931.

Magnetfeld nicht aufgehoben werden und ist daher auch im magnetisch gesättigten Zustand vorhanden. Sie kann also für die erwähnte Anomalie des Elastizitätsmoduls verantwortlich sein.

Man kann leicht berechnen, ob diese Deutung die Größenordnung richtig wiedergibt. Es sei etwa l die Länge eines Stabes, der im Felde Null und bei der Spannung Null die Länge l_0 hat. Im magnetisch gesättigten Zustand ist l noch eine Funktion der Zugspannung σ und des Betrages M der spontanen Magnetisierung: $l = l(\sigma; M)$. M sei dabei bezogen auf diejenige Substanzmenge, die im unverspannten Zustand ohne Feld in 1 cm^3 enthalten ist. Wenn sich beim Anlegen einer Zugspannung der Betrag der spontanen Magnetisierung nicht ändern würde, wäre der beobachtete Elastizitätsmodul E_M gegeben durch

$$(1) \quad \frac{1}{E_M} = \frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial \sigma} \right)_M.$$

Dieser Elastizitätsmodul sollte keine Anomalie aufweisen, sondern am Curiepunkt einen glatten Verlauf in Abhängigkeit von der Temperatur haben. Tatsächlich beobachtet man aber im magnetisch gesättigten Zustand den Elastizitätsmodul bei konstantem Feld, E_H , und für diesen folgt:

$$(2) \quad \frac{1}{E_H} = \frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial \sigma} \right)_H = \frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial \sigma} \right)_M + \frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial M} \right)_\sigma \cdot \left(\frac{\partial M}{\partial \sigma} \right)_H.$$

Die bei der Differentiation konstant zu haltenden Größen sind dabei in üblicher Weise als Index angegeben.

Nun folgt aber aus thermodynamischen Überlegungen die Gleichung¹⁾:

$$(3) \quad \left(\frac{\partial M}{\partial \sigma} \right)_H = \frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial H} \right)_\sigma.$$

Ferner gilt:

$$(4) \quad \left(\frac{\partial l}{\partial M} \right)_\sigma = \frac{\left(\frac{\partial l}{\partial H} \right)_\sigma}{\left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_\sigma}.$$

Somit erhalten wir

$$(5) \quad \frac{1}{E_H} - \frac{1}{E_M} = \frac{\left[\frac{1}{l_0} \left(\frac{\partial l}{\partial H} \right)_\sigma \right]^2}{\left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_\sigma}.$$

Im Zähler steht die Steilheit der Längsmagnetostriktion im Sättigungsgebiet. Diese ist gleich $1/3$ der Steilheit der Volumen-

1) R. Becker, Ztschr. f. Phys. 87. S. 547. 1934.

magnetostriktion. Für die Legierung mit 40% Ni, 60% Fe ist nach Masiyama¹⁾ bei Zimmertemperatur $\frac{1}{v_0} \frac{\partial v}{\partial H} = 0,68 \cdot 10^{-8}$ pro Oersted. Also gilt $\left(\frac{1}{l_0} \frac{\partial l}{\partial H}\right)_0 = 0,23 \cdot 10^{-8}$. Im Nenner von (5) steht die Änderung des Betrages der spontanen Magnetisierung im Feld. Bei Zimmertemperatur ist diese Größe bei den reinen Metallen so klein, daß eine Messung bisher nicht gelungen ist. Nur in der Nähe des Curiepunktes war es bisher möglich, diese „wahre“ Magnetisierbarkeit zu messen. Für Eisen-Nickel-Legierungen liegen bisher keine Messungen vor. Jedoch kann man wohl annehmen, daß man diese Größe größenordnungsmäßig richtig erhält, wenn man sie nach der Weißschen Theorie berechnet. Danach gilt

$$\frac{M}{M_\infty} = \mathfrak{I}g \left[\frac{\mu}{kT} (H + NM) \right].$$

Daraus folgt, wenn man N als konstant ansieht:

$$\frac{dM}{dH} = \frac{1}{N \left[\frac{kT}{\mu M_\infty N} \mathfrak{I}g^2 \frac{\mu}{kT} (H + NM) - 1 \right]}.$$

Berücksichtigt man, daß im Rahmen dieser Theorie $\frac{\mu M_\infty N}{k} = \Theta$ (Θ = Curietemperatur) gilt, so erhält man mit den Daten $\Theta = 340^\circ \text{C}$, $M_\infty = 1450$ CGS.-Einheiten²⁾ für die Legierung mit 40% Ni $N \approx 3500$ und somit unter Vernachlässigung von H gegen NM für Zimmertemperatur

$$\frac{dM}{dH} = \frac{1}{N \left[\frac{T}{\Theta} \mathfrak{I}g^2 \left(\frac{\Theta}{T} \cdot \frac{M}{M_\infty} \right) - 1 \right]} \approx 0,8 \cdot 10^{-4},$$

$$\left(\frac{M}{M_\infty} = 0,85; \quad \frac{T}{\Theta} = 0,47 \right).$$

Nimmt man N als abhängig von der Gitterkonstanten an, wie es Kornetzki³⁾ angenommen hat, und ermittelt den Differentialquotienten dN/dv aus der Steilheit der Volumenmagnetostriktion, so erhält man unter Berücksichtigung der Tatsache, daß sich N im Felde wegen der Volumenmagnetostriktion ändert, einen um einen Faktor 1,8 größeren Wert von dM/dH , also die gleiche Größenordnung von etwa 10^{-4} CGS.-Einheiten. Setzen wir diese

1) Y. Masiyama, Sc. Rep. Toh. Univ. **20**. S. 574. 1931.

2) Crit. Tables VI. 394. 1. Aufl. 1929.

3) M. Kornetzki, Ztschr. f. Phys. **98**. S. 280. 1935.

Zahlenwerte in (5) ein, so erhalten wir für die Legierung mit 40% Ni bei Zimmertemperatur angenähert

$$\frac{1}{E_H} - \frac{1}{E_M} = 5 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{dyn}.$$

Da der Elastizitätsmodul selbst etwa $E = 1,6 \cdot 10^{12} \text{ dyn/cm}^2$ beträgt, folgt somit für den relativen Unterschied zwischen E_H und E_M

$$\frac{E_M - E_H}{E_M} \approx 0,1,$$

also etwa 10%.

Nach O. Engler ist bei der Legierung mit 42% Ni der Elastizitätsmodul im magnetisch gesättigten Zustande bei Zimmertemperatur $E_H = 1,62 \cdot 10^{12} \text{ dyn/cm}^2$. Extrapoliert man den Verlauf des Elastizitätsmoduls oberhalb des Curiepunktes zu tieferen Temperaturen, so erhält man für den Elastizitätsmodul bei konstanter Magnetisierung für Zimmertemperatur angenähert $E_M = 1,8 \cdot 10^{12} \text{ dyn/cm}^2$

(vgl. Abb. 1). Also ist der relative Unterschied $\frac{E_M - E_H}{E_M}$ hier in der Tat von der gleichen Größenordnung von 10%. Es erscheint demnach tatsächlich möglich, diese Anomalie in der beschriebenen Weise zu deuten. Daß sie nur bei dieser Legierung hervortritt, ist ebenfalls verständlich. Denn bei allen anderen Legierungen und reinen Metallen, an denen bisher die Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls und des ΔE -Effektes gemessen worden ist, ist die Steilheit der Volumenmagnetostriktion 10 bis 50mal kleiner. Da die Anomalie proportional dem Quadrat dieser Steilheit ist, beträgt sie also bei diesen anderen Substanzen nur 10^{-3} bis 10^{-4} , und das ist unbeobachtbar klein.

Eine endgültige Entscheidung, ob die hier vorgeschlagene Deutung für diese Anomalie zutrifft, ist natürlich erst möglich durch wirkliche Messung der „wahren“ Magnetisierbarkeit in der Nähe des Curiepunktes und der Steilheit der Magnetostriktion im Sättigungsgebiet am gleichen Material. Eine Prüfung wäre aber auch möglich durch Messung der Temperaturabhängigkeit des Kompressionsmoduls. Da unter allseitigem Druck eine Drehung der Magnetisierungsvektoren nicht auftritt, macht sich der gewöhnliche ΔE -Effekt im Kompressionsmodul nicht bemerkbar. Bei den Materialien, bei denen die hier besprochene Anomalie wegen der Kleinheit der Volumenmagnetostriktion nicht hervortritt, sollte also der Kompressionsmodul einen glatten Verlauf in Abhängigkeit von der Temperatur zeigen, auch bei der Feldstärke Null. Bei der hier behandelten Legierung muß jedoch im Kompressionsmodul ebenfalls

eine starke Anomalie auftreten. Denn ebenso wie (5) folgt für den Kompressionsmodul bei konstantem Feld K_H und bei konstantem Betrage der spontanen Magnetisierung K_M die Beziehung

$$(6) \quad \frac{1}{K_H} - \frac{1}{K_M} = \frac{\left[\frac{1}{v_0} \left(\frac{\partial v}{\partial H} \right)_p \right]^2}{\left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_p}.$$

Die Anomalie im Kompressionsmodul ist also noch neunmal größer als diejenige im Elastizitätsmodul.

Herrn Prof. R. Becker bin ich für fördernde Diskussionen zu großem Dank verpflichtet. Ferner danke ich Herrn Dr. Ahrens und Herrn Dr. Engler, die Herrn Prof. Becker und mich gelegentlich eines Besuches im Institut für technische Physik in Jena auf das besprochene anomale Verhalten der Eisen-Nickel-Legierung mit 42% Ni aufmerksam machten.

Göttingen, Institut für theoretische Physik der Universität,
im Mai 1938.

(Eingegangen 15. Mai 1938)

Über die Bestimmung gewisser Eigenwerte der Wellenmechanik

Von P. Urban

I. Einleitung

Die einfachsten Differentialgleichungen zweiter Ordnung, welche in der Wellenmechanik auftreten, führen bei Integration durch Reihen auf eine zweigliedrige Rekursionsformel; als Beispiel kann man die Differentialgleichung für die radialen Wasserstoffeigenfunktionen (Laguerrepolynome), den harmonischen Oszillator (Hermitepolynome) usw. anführen. In diesen Fällen läßt sich die Integration besonders leicht durchführen und die Eigenwerte ergeben sich in übersichtlicher Weise aus der Abbruchbedingung. Diese Klasse von Differentialgleichungen, welche auf eine zweigliedrige Rekursionsformel führt, wurde bereits allgemein behandelt¹⁾).

Es gibt nun eine wichtige Klasse von Differentialgleichungen der Wellenmechanik, die sich dadurch kennzeichnet, daß bei Substitution des bekannten Potenzreihenansatzes, der die Differentialgleichung formal befriedigen soll, als Bedingung hierfür, eine dreigliedrige Rekursionsformel auftritt. Die wellenmechanische Regularitätsbedingung verlangt dann im allgemeinen, daß eine gewisse, aus der Rekursionsformel folgende, unendliche Determinante verschwindet, welche eine transzendente Gleichung zur Ermittlung der Eigenwerte darstellt.

Für die Berechnung der Eigenwerte ist es zweckmäßig die Rekursionsformel in einen Kettenbruch zu verwandeln, der die Eigenwerte in Form von Potenzreihen anzuschreiben gestattet.

Im folgenden wollen wir zuerst die allgemeinste Form einer Differentialgleichung, welche auf eine dreigliedrige Rekursionsformel führt, angeben und für diese die Eigenwerte, unter bestimmten Voraussetzungen, allgemein ermitteln. Es zeigt sich, bei Vergleich mit der sonst üblichen Störungsrechnung von Schrödinger, die Äquivalenz beider Methoden und der große Vorteil des Verfahrens, der darin besteht, daß die Eigenfunktionen nicht ermittelt zu werden brauchen.

1) Forsyth, Theorie der Diff.-Gleichungen (Jacobssthal) vgl. Zusatz.

2) F. Brouwer, Ann. d. Phys. [4] 84. S. 915—921. 1927.

Am Schlusse der Arbeit wird an zwei Beispielen die Anwendung der abgeleiteten Formeln behandelt. Das erste betrifft eine Art verallgemeinerter Kugelfunktionen und behandelt den gehemmten Rotator oder einfacher das sphärische Pendel in der Wellenmechanik¹⁾. Linus Pauling (a. a. O.) führte es als Modell für Moleküle mit gehemmter Rotation ein und kam in seiner Arbeit auf ein Mathieusche Differentialgleichung. Die hierbei gefundenen Eigenwerte verwendet er, unter Benutzung bekannter Formeln der kinetischen Gastheorie, zur Berechnung der spezifischen Wärmen. Er behandelte jedoch nur den eindimensionalen Fall. Wir untersuchen die Differentialgleichung für den räumlichen Fall sowohl nach der Methode der Störungsrechnung von E. Schrödinger, als auch nach dem Kettenbruchverfahren und zeigen die Übereinstimmung der nach beiden Methoden erhaltenen Resultate.

Als zweites Beispiel behandeln wir eine Differentialgleichung des Wasserstoffmolekülions, über welche in zahlreichen Abhandlungen für die Eigenwerte Näherungsformeln aufgestellt wurden²⁾. Wir werden alle diese durch eine einzige Formel darstellen, welche sich als Spezialfall unserer allgemeinen Formel ergibt und sämtliche Eigenwerte bis zur zweiten Näherung zu berechnen gestattet. Dieselben werden sich dann, mit den in der Literatur angegebenen Werten übereinstimmend erweisen.

II. Bestimmung der Eigenwerte

Die Frobeniussche Normalform einer Differentialgleichung zweiter Ordnung, welche auf eine dreigliedrige Rekursionsformel führt, lautet:

$$(1) \quad \begin{cases} x^2(\alpha_2 + \beta_2 x^h + \gamma_2 x^l) y'' + x(\alpha_1 + \beta_1 x^h + \gamma_1 x^l) y' \\ + (\alpha_0 + \beta_0 x^h + \gamma_0 x^l) y = \sum_{i=0}^2 x^i (\alpha_i + \beta_i x^h + \gamma_i x^l) y^{(i)} = 0. \end{cases}$$

Hierbei setzen wir $l = k \cdot h$ ($k = 2, 3, 4, \dots$) und wählen $x = 0$ als eine singuläre Stelle der Bestimmtheit. Führt man nun zur Vereinfachung die Funktionen

$$(2) \quad \begin{cases} \psi(\varrho) = \alpha_2 \varrho(\varrho - 1) + \alpha_1 \varrho + \alpha_0 \\ \varphi(\varrho) = \beta_2 \varrho(\varrho - 1) + \beta_1 \varrho + \beta_0 \\ \chi(\varrho) = \gamma_2 \varrho(\varrho - 1) + \gamma_1 \varrho + \gamma_0 \end{cases}$$

1) Linus Pauling, Phys. Rev. 36. Nr. 3. 1930.

2) A. H. Wilson, London Proceedings 118. S. 635. 1928; G. Jaffé, Ztschr. f. Phys. 87. S. 535. 1934, mit besonders ausführlichen Literaturangaben; W. G. Baber u. H. R. Hassé, Proceedings of the Cambridge Phil. Soc. 31. Part. 4. 1935.

ein, so ergibt sich die determinierende Fundamentalgleichung in der Form

$$(3) \quad \psi(\varrho) = 0.$$

Sie besitzt zwei Wurzeln, die wir mit ϱ_1 und ϱ_2 bezeichnen wollen und zu welchen je ein partikuläres Integral der Differentialgleichung (1) gehört. Nun ergibt der Potenzreihenansatz

$$(4) \quad y = x^\varrho \sum_{m=0}^{\infty} c_{mh} \cdot x^{mh}$$

die Rekursionsformel

$$(5) \quad c_r \psi(\varrho + \nu) + c_{r-h} \varphi(\varrho + \nu - h) + c_{r-l} \chi(\varrho + \nu - l) = 0,$$

welche für $\nu = h, 2h, 3h, \dots$ das System für die Bestimmung der Koeffizienten c_{mh} liefert.

Als Bedingung für die Existenz von Lösungen des Gleichungssystems erhält man die unendliche Determinante:

$$(6) \quad \Delta = \begin{vmatrix} \psi(\varrho), \psi(\varrho+h), 0, 0, \dots & 0 \\ 0, \varphi(\varrho+h), \psi(\varrho+2h), 0, \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \chi(\varrho), 0, 0, \dots, \varphi[\varrho+h(k-1)], \psi[\varrho+kh], 0, \dots & 0 \\ \dots & \dots \end{vmatrix} = 0,$$

welche verschwinden muß und die transzendente Bestimmungsgleichung der Eigenwerte darstellt, welche zu jeder der beiden Wurzeln ϱ_1 und ϱ_2 der determinierenden Fundamentalgleichung (F.G.) (3) gehören. Wir setzen nun, was in den meisten Fällen gilt:

$$(7) \quad k = 2 \quad (l = 2h)$$

und untersuchen die Konvergenz der Potenzreihenlösungen (4). Für große Werte von ν erhält man, da

$$(8) \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \left| \frac{c_\nu}{c_{\nu-h}} \right| = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \left| \frac{c_{\nu-h}}{c_{\nu-2h}} \right| = G$$

gilt aus (5)

$$(8a) \quad \frac{c_\nu}{c_{\nu-h}} \psi(\varrho + \nu) + \varphi(\varrho + \nu - h) + \frac{\chi(\varrho + \nu - 2h)}{\frac{c_{\nu-h}}{c_{\nu-2h}}} = 0$$

und schließlich die quadratische Gleichung

$$G^2 \cdot \psi(\varrho + \nu) + G \varphi(\varrho + \nu - h) + \chi(\varrho + \nu - 2h) = 0$$

oder

$$(9) \quad G^2 + G \frac{\varphi(\varrho + \nu - h)}{\psi(\varrho + \nu)} + \frac{\chi(\varrho + \nu - 2h)}{\psi(\varrho + \nu)} = 0.$$

Setzt man die Werte aus (2) in die Koeffizienten derselben ein und geht zur Grenze über, so bekommt man

$$(10) \quad G^2 + \frac{\beta_2}{\alpha_2} G + \frac{\gamma_2}{\alpha_2} = 0,$$

welche Gleichung die Lösungen:

$$(11) \quad G_{1,2} = -\frac{1}{2} \frac{\beta_2}{\alpha_2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\beta_2}{\alpha_2} \right)^2 - \frac{\gamma_2}{\alpha_2}}$$

besitzt. Im Falle, daß

$$(12) \quad \gamma_2 = 0$$

ist (was bei den von uns betrachteten Differentialgleichungen der Fall war) erhält man

$$(13) \quad G_{1,2} = -\frac{1}{2} \frac{\beta_2}{\alpha_2} \pm \frac{1}{2} \frac{\beta_2}{\alpha_2} = \begin{cases} 0, \\ -\frac{\beta_2}{\alpha_2} \neq 0; \end{cases}$$

Der erste Wert liefert eine ganze transzendente Funktion, da

$$(14) \quad G = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \left| \frac{c_\nu}{c_{\nu-h}} \right| = \frac{1}{R}$$

einen Konvergenzradius $R = \infty$ ergibt. In diesem Falle erhalten wir eine in der ganzen Ebene konvergente Lösung.

In den oben zitierten Abhandlungen von G. Jaffé und W. G. Baber und H. R. Hassé wird gezeigt, daß die Lösung der Differenzengleichung (5) in Form eines unendlichen Kettenbruches angeschrieben werden kann. Es wird an dieser Stelle auf die Arbeit von Nörlund (Differenzenrechnung) und auf eine sehr interessante Arbeit von H. Galbrun¹⁾ verwiesen. Voraussetzung ist allerdings, daß das asymptotische Verhalten der Lösungen der Differenzengleichungen (5) bekannt ist.

Eine direkte Behandlung der unendlichen Determinante (6) ist wegen ihrer nicht genug schnellen Konvergenz nicht zweckmäßig. (Die Methoden von Niven und MacLaurin sind sehr mühselig.) Wir schlagen folgenden, zuerst von Wilson (a.a.O.) eingeschlagenen Weg ein: Erst entwickeln wir die Determinante in einen Kettenbruch und dann bestimmen wir durch ein Näherungsverfahren die Eigen-

1) H. Galbrun, Bull. Soc. Math. d. France 49. S. 206. 1921.

werte mit beliebiger Genauigkeit. Die Rekursionsformel (5) ergibt für $l = 2h$, wenn

$$(15) \quad \frac{c_v}{c_{v-h}} = N_{v-h}$$

gesetzt wird,

$$(16) \quad N_{v-h} \psi(\varrho + v) + \varphi(\varrho + v - h) + \frac{1}{N_{v-2h}} \chi(\varrho + v - 2h) = 0.$$

Hieraus bekommt man für $v = 2h$

$$(17) \quad N_0 = \frac{\chi(\varrho)}{\varphi(\varrho + h) + \psi(\varrho + 2h) N_h}.$$

Die Gl. (5) ergibt für $v = h$ ($l = 2h$)

$$(18) \quad N_0 = \frac{c_h}{c_0} = - \frac{\varphi(\varrho)}{\psi(\varrho + h)}.$$

Aus (16) bekommt man für $v = 3h$:

$$(19) \quad N_h = - \frac{\chi(\varrho + h)}{\varphi(\varrho + 2h) + \psi(\varrho + 3h) N_{2h}}.$$

Daher erhält man schließlich:

$$(20) \quad N_0 = \frac{-\varphi(\varrho)}{\psi(\varrho + h)} = \frac{-\chi(\varrho)}{\varphi(\varrho + h) - \frac{\chi(\varrho + h) \cdot \psi(\varrho + 2h)}{\varphi(\varrho + 2h) - \frac{\chi(\varrho + 2h) \psi(\varrho + 3h)}{\varphi(\varrho + 3h) - \dots \text{ad. inf.}}}}.$$

Die erste Kettenbruchbeziehung. Man kann sie auch in der Form anschreiben:

$$(21) \quad \varphi(\varrho) = \frac{\chi(\varrho) \psi(\varrho + h)}{\varphi(\varrho + h) - \frac{\chi(\varrho + h) \psi(\varrho + 2h)}{\varphi(\varrho + 2h) - \frac{\chi(\varrho + 2h) \psi(\varrho + 3h)}{\varphi(\varrho + 3h) - \frac{\chi(\varrho + 3h) \psi(\varrho + 4h)}{\varphi(\varrho + 4h) - \dots \text{ad. inf.}}}}.$$

Zur Verbesserung der Konvergenz formen wir den Kettenbruch unter Benützung folgender Identitäten um:

$$(22) \quad \begin{cases} \varphi(\varrho) \equiv \varphi(\varrho) - \varphi(0) + \beta_0 \\ \varphi(\varrho + h) \equiv \varphi(\varrho + h) - \varphi(0) + \beta_0 \\ \varphi(\varrho + 2h) \equiv \varphi(\varrho + 2h) - \varphi(0) + \beta_0 \\ \dots \\ \dots \end{cases}$$

Durch geeignete Division erhält man unsere endgültige Form:

$$(23) \quad \left\{ \begin{aligned} \varphi(\varrho) &= \varphi(\varrho) - \varphi(0) + \beta_0 \\ &= \frac{\frac{\chi(\varrho) \psi(\varrho + h)}{\varphi(\varrho + h) - \varphi(0)}}{1 + \frac{\beta_0}{\varphi(\varrho + h) - \varphi(0)} - \frac{\frac{\chi(\varrho + h) \psi(\varrho + 2h)}{[\varphi(\varrho + h) - \varphi(0)][\varphi(\varrho + 2h) - \varphi(0)]}}{1 + \frac{\beta_0}{\varphi(\varrho + 2h) - \varphi(0)}} \dots \text{ad. inf.} \end{aligned} \right.$$

Da das Konvergenzkriterium für den Kettenbruch

$$\lim_{m \rightarrow \infty} N_m = 0$$

erfüllt ist, so konvergiert der Kettenbruch und unsere Entwicklung hat einen Sinn¹⁾.

Aus diesem Kettenbruch kann man nun eine Reihe von Werten für den Eigenwertparameter ermitteln (wir betrachten β_0 als solchen).

Im Falle $h = 2$ ergibt sich der Kettenbruch:

$$(24) \quad \left\{ \begin{aligned} \varphi(\varrho) &= \varphi(\varrho) - \varphi(0) + \beta_0 \\ &= \frac{\frac{\chi(\varrho) \psi(\varrho + 2)}{\varphi(\varrho + 2) - \varphi(0)}}{1 + \frac{\beta_0}{\varphi(\varrho + 2) - \varphi(0)} - \frac{\frac{\chi(\varrho + 2) \psi(\varrho + 4)}{[\varphi(\varrho + 2) - \varphi(0)][\varphi(\varrho + 4) - \varphi(0)]}}{1 + \frac{\beta_0}{\varphi(\varrho + 4) - \varphi(0)}} \dots \text{ad. inf.} \end{aligned} \right.$$

und im Falle, daß außerdem die eine Wurzel ϱ_1 gleich Null ist ($\varrho_1 = 0$) reduziert sich der Kettenbruch auf:

$$(25) \quad \varphi(0) = \beta_0 = \frac{\frac{\chi(0) \psi(2)}{\varphi(2) - \varphi(0)}}{1 + \frac{\beta_0}{\varphi(2) - \varphi(0)} - \frac{\frac{\chi(2) \psi(4)}{[\varphi(2) - \varphi(0)][\varphi(4) - \varphi(0)]}}{1 + \frac{\beta_0}{\varphi(4) - \varphi(0)}} \dots \text{ad. inf.}$$

Um nun die Werte von β_0 mit beliebiger Genauigkeit berechnen zu können, ersetzen wir den Kettenbruch durch seine Näherungsbrüche, ermitteln aus diesen die Werte von β_0 und setzen hierauf in den nächst höheren Näherungsbruch ein. Wir bekommen dann aus diesem einen besseren Näherungswert. Das Verfahren setzt voraus, daß die Größen $\chi(\varrho)$, $\chi(\varrho + h)$, ... usw. sämtlich klein sind.

1) Vgl. Perron, Die Lehre von den Kettenbrüchen, S. 468.

Sie sind in den einzelnen Fällen selbstredend Konstante, da ja ϱ , bzw. h feste gegebene Größen sind, die für jede β_0 -Ermittlung eingesetzt werden. Um die $(r+1)$ -te Wurzel zu bestimmen, invertieren wir Gl. (23) r -mal: Wir erhalten mit den Abkürzungen:

$$(26) \quad \begin{cases} D_r = \varphi(\varrho + rh) - \varphi(0) \\ A_r = \varphi[\varrho + rh] - \varphi[\varrho + (r-1)h]. \end{cases}$$

$$(27) \quad \left\{ \begin{aligned} & \frac{\frac{\chi(\varrho + rh)}{\psi[\varrho + (r+2)h]} - \frac{\frac{\beta_0 + D_{r+1}}{\psi[\varrho + (r+2)h]} - \frac{\frac{\chi[\varrho + (r+1)h]}{\psi[\varrho + (r+3)h]} - \frac{\beta_0 + D_{r+2}}{\psi[\varrho + (r+3)h]} - \dots \text{ad. inf.}}{\frac{\beta_0 + D_r}{\psi[\varrho + (r+1)h]} - \frac{\frac{\chi[\varrho + (r-1)h]}{\psi[\varrho + (r+1)h]} - \frac{\chi[\varrho + (r-2)h]}{\psi[\varrho + rh]} - \frac{\beta_0 + D_{r-1}}{\psi[\varrho + rh]} - \frac{\frac{\chi[\varrho + (r-1)h]}{\psi[\varrho + (r-1)h]} - \frac{\beta_0 + D_{r-2}}{\psi[\varrho + (r-1)h]} - \dots \frac{\beta_0 + D_0}{\psi(\varrho + h)}} \end{aligned} \right.$$

Daraus erhält man nunmehr, nach dem oben beschriebenen Verfahren für die Lösungen $\beta_0^{(r)}$:

$$(28) \quad \left\{ \begin{aligned} \beta_0^{(r)} &= \varphi(0) - \varphi(\varrho + rh) \\ &+ \frac{\chi(\varrho + rh)\psi[\varrho + (r+1)h]A_r - \chi[\varrho + (r-1)h]\psi[\varrho + rh]A_{r+1}}{A_r \cdot A_{r+1}} \\ &+ \frac{\chi[\varrho + (r-1)h]\psi[\varrho + rh]\{\chi[\varrho + (r-1)h]\psi[\varrho + rh]A_{r+1} - \chi(\varrho + rh)\psi[\varrho + (r+1)h]A_r\}}{A_r^3 \cdot A_{r+1}} \\ &+ \frac{\chi[\varrho + rh]\psi[\varrho + (r+1)h]\{\chi[\varrho + (r-1)h]\psi[\varrho + rh]A_{r+1} - \chi[\varrho + rh]\psi[\varrho + (r+1)h]A_r\}}{A_{r+1}^3 \cdot A_r} \\ &+ \frac{\chi[\varrho + rh]\psi[\varrho + (r+1)h]\chi[\varrho + (r+1)h]\psi[\varrho + (r+2)h]}{A_{r+1}^2[A_{r+1} + A_{r+2}]} \\ &- \frac{\chi[\varrho + (r-1)h]\psi[\varrho + rh]\chi[\varrho + (r-2)h]\psi[\varrho + (r-1)h]}{A_r^2[A_r + A_{r-1}]}; \end{aligned} \right.$$

wobei $r = 0, 1, 2, 3, \dots$ gesetzt werden muß und die Argumente von φ , ψ , χ , nicht kleiner als ϱ sein dürfen. Die Wurzeln $\beta_0^{(r)}$ hängen auch von den Werten der Größen ϱ und h ab. In einigen Fällen (vgl. unter Beispiele) empfiehlt es sich der Größe $\beta_0^{(r)}$ einen

oberen Index $i = r \cdot h + \rho + 1$ statt r zu geben um diese Abhängigkeit zum Ausdruck zu bringen. Dadurch erzielen wir Übereinstimmung mit der Terminologie von Wilson (a. a. O.) wie im Beispiel 1 gezeigt wird. Sonst wäre diese Bezeichnungsweise etwas kompliziert, speziell beim Auftreten von nicht ganzzahligen Wurzeln der determinierenden Fundamentalgleichung. Ersetzt man also r durch $i = r \cdot h + \rho + 1$ in (28), so kann man i als laufenden Index statt r einführen und man bekommt im Falle $\rho = 0$ und $h = 2$

$$(29) \quad \left\{ \begin{aligned} \beta_0^{(i)} &= \varphi(0) - \varphi(i-1) \\ &+ \frac{\chi(i-1)\psi(i+1)\frac{A_{i-1}}{2} - \chi(i-3)\psi(i-1)\frac{A_{i+1}}{2}}{\frac{A_{i-1}}{2} \cdot \frac{A_{i+1}}{2}} \\ &+ \frac{\chi(i-3)\psi(i-1)\left\{\chi(i-3)\psi(i-1)\frac{A_{i+1}}{2} - \chi(i-1)\psi(i+1)\frac{A_{i-1}}{2}\right\}}{\frac{A_{i-1}^3}{2} \cdot \frac{A_{i+1}}{2}} \\ &+ \frac{\chi(i-1)\psi(i+1)\left\{\chi(i-3)\psi(i-1)\frac{A_{i+1}}{2} - \chi(i-1)\psi(i+1)\frac{A_{i-1}}{2}\right\}}{\frac{A_{i+1}^3}{2} \cdot \frac{A_{i-1}}{2}} \\ &+ \frac{\chi(i-1)\psi(i+1)\chi(i+1)\psi(i+3)}{\frac{A_{i+1}^2}{2} \left[\frac{A_{i+1}}{2} + \frac{A_{i+3}}{2}\right]} - \frac{\chi(i-3)\psi(i-1)\chi(i-5)\psi(i-3)}{\frac{A_{i-1}^2}{2} \left[\frac{A_{i-1}}{2} + \frac{A_{i-3}}{2}\right]}, \end{aligned} \right.$$

wobei $i = 2 \cdot r + 1$ ($r = 0, 1, 2, 3, \dots$) zu setzen ist.

Für $\rho = 1$ und $h = 2$ ergibt sich:

$$(30) \quad \left\{ \begin{aligned} \beta_0^{(i)} &= \varphi(0) - \varphi(i-1) \\ &+ \frac{\chi(i-1)\psi(i+1)\frac{A_{i-2}}{2} - \chi(i-3)\psi(i-1)\frac{A_i}{2}}{\frac{A_{i-2}}{2} \cdot \frac{A_i}{2}} \\ &+ \frac{\chi(i-3)\psi(i-1)\left\{\chi(i-3)\psi(i-1)\frac{A_i}{2} - \chi(i-1)\psi(i+1)\frac{A_{i-2}}{2}\right\}}{\frac{A_{i-2}^3}{2} \cdot \frac{A_i}{2}} \\ &+ \frac{\chi(i-1)\psi(i+1)\left\{\chi(i-3)\psi(i-1)\frac{A_i}{2} - \chi(i-1)\psi(i+1)\frac{A_{i-2}}{2}\right\}}{\frac{A_i^3}{2} \cdot \frac{A_{i-2}}{2}} \\ &+ \frac{\chi(i-1)\psi(i+1)\chi(i+1)\psi(i+3)}{\frac{A_i^2}{2} \left[\frac{A_i}{2} + \frac{A_{i+2}}{2}\right]} - \frac{\chi(i-3)\psi(i-1)\chi(i-5)\psi(i-3)}{\frac{A_{i-2}^2}{2} \left[\frac{A_{i-2}}{2} + \frac{A_{i-4}}{2}\right]}, \end{aligned} \right.$$

wobei $i = 2 \cdot r + 2$ gilt ($r = 0, 1, 2, 3, \dots$). Bei Vergleich der Formeln (29) und (30) sieht man, daß sie einander entsprechen, bzw. daß man aus einer der beiden für $i = 1, 2, 3, \dots$ allein sämtliche Werte von $\beta_0^{(i)}$ berechnen kann. Man kann also die Wurzeln aus einer der beiden Formeln fortlaufend berechnen.

Selbstredend ist noch zu beachten, nach welcher Größe die Eigenwerte entwickelt werden sollen. Wir behandeln allgemein die Eigenwerte $\beta_0^{(i)}$ als Funktion von $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$ also χ ; man kann auch andere Annahmen als Ausgangspunkt unserer Betrachtungen wählen und erhält analoge Formeln.

Hiermit sind wir am Ende unserer mathematischen Ausführungen angelangt und wollen uns den Anwendungen zuwenden.

III. Anwendungen auf Probleme der Wellenmechanik

1. Wie eingangs erwähnt wurde, ist in einer Arbeit von Linus Pauling der gehemmte Rotator eindimensional behandelt worden. Wir wollen nun dieses Problem für den räumlichen Fall untersuchen. Als Ausgangspunkt nehmen wir die Schrödingergleichung in räumlichen Polarkoordinaten:

$$(31) \quad \left\{ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \right\} \psi = 0.$$

In dieser setzen wir nun $r = a = \text{const}$ und führen für $m \cdot a^2 = J$ (das Trägheitsmoment) ein, wodurch die Form für unser Beispiel geeignet wird. Wir erhalten:

$$(32) \quad \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} + \frac{8\pi^2 J}{h^2} (E - V) \psi = 0.$$

Für die potentielle Energie setzen wir (a. a. O.)

$$(33) \quad V = V_0 (1 - \cos 2\vartheta)$$

und erhalten schließlich

$$(34) \quad \left\{ \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} + \frac{8\pi^2 J}{h^2} [E - V_0 (1 - \cos 2\vartheta)] \right\} \psi = 0.$$

Nun separieren wir diese Gleichung durch den bekannten Ansatz:

$$(35) \quad \psi = \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi),$$

wodurch sie in folgende Gleichungen zerfällt:

$$\text{I. } \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0 \quad \text{mit der Lösung} \quad \Phi = e^{\pm i m \varphi}$$

und

$$\text{II. } \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \frac{8\pi^2 J}{h^2} [E - V_0(1 - \cos 2\vartheta)] \cdot \sin^2 \vartheta = m^2.$$

Setzen wir in letztere für $\cos \vartheta = z$, so nimmt sie die Form an:

$$(36) \quad \left\{ \frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{d\Theta}{dz} \right] + \left[\frac{8\pi^2 J}{h^2} (E - 2V_0) - \frac{m^2}{1 - z^2} + \frac{16\pi^2 J}{h^2} V_0 \cdot z^2 \right] \Theta = 0. \right.$$

Hieraus erhält man, wenn man noch substituiert:

$$(37) \quad \left\{ \begin{matrix} z \dots \xi \\ \Theta \dots X \end{matrix} \right\} \frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dX}{d\xi} \right] + \left\{ \lambda^2 \xi^2 - \frac{m^2}{1 - \xi^2} + \mu \right\} X = 0,$$

wobei für $\lambda^2 = \frac{16\pi^2 J V_0}{h^2}$; $\mu = \frac{8\pi^2 J}{h^2} (E - 2V_0)$ gesetzt wurde und $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ die Folge der ganzen positiven Zahlen durchlaufen muß. Diese Gleichung ist nun die verallgemeinerte Wellengleichung, wie sie schon A. H. Wilson (a. a. O.) behandelt hat. Wir setzen nunmehr

$$(38) \quad X = (1 - \xi^2)^{m/2} \cdot f,$$

wodurch sie in die Form übergeht

$$(39) \quad (1 - \xi^2) \frac{d^2 f}{d\xi^2} - 2(m+1)\xi \frac{df}{d\xi} + \{\lambda^2 \xi^2 + \mu - m(m+1)\} f = 0,$$

die auf unseren Typus einer Differentialgleichung mit dreigliedriger Rekursionsformel zugeschnitten ist; man muß sie nur auf die Normalform von Frobenius bringen (1). Durch Vergleich findet man dann die Werte:

$$\left. \begin{array}{lll} \alpha_2 = 1; & \beta_2 = -1; & \gamma_2 = 0 \\ \alpha_1 = 0; & \beta_1 = -2(m+1); & \gamma_1 = 0 \\ \alpha_0 = 0; & \beta_0 = \mu - m(m+1); & \gamma_0 = \lambda^2 \end{array} \right\} \begin{array}{l} h = 2, \quad k = 2 \\ l = 4. \end{array}$$

Es ergibt sich die determinierende Fundamentalgleichung:

$$(40) \quad \psi(\varrho) = \varrho(\varrho - 1) = 0,$$

welche die Wurzeln $\varrho_1 = 0$; $\varrho_2 = 1$ besitzt. Diese Wurzeln unterscheiden sich nicht um ein Vielfaches von $h = 2$, daher gehört

auch zur kleineren Wurzel ϱ_1 eine Reihe. Ferner bekommen wir noch

$$(41) \quad \begin{cases} \varphi(\varrho) = -\varrho(\varrho - 1) - 2(m+1)\varrho + \mu - m(m+1) \\ \chi(\varrho) = \lambda^2 = \text{const.} \end{cases}$$

Setzen wir diese Werte alle in Gl. (29) oder (30) ein, so bekommen wir für die Eigenwerte folgende Reihe (die ersten drei Glieder):

$$(42) \quad \left\{ \begin{aligned} \mu_i &= (m+i)(m+i-1) \\ &+ \frac{(i-2)(i-1)(2m+2i+1) - i(i+1)(2m+2i-3)}{2(2m+2i-3)(2m+2i+1)} \lambda^2 \\ &+ \left\{ \frac{(i-1)(i-2)(i-3)(i-4)}{16(2m+2i-3)^2(2m+2i-5)} - \frac{i(i+1)(i+2)(i+3)}{16(2m+2i+1)^2(2m+2i+3)} \right. \\ &+ \frac{[i(i+1)]^2(2m+2i-3) - (i-2)(i-1)i(i+1)(2m+2i+1)}{8(2m+2i+1)^3(2m+2i-3)} \\ &\left. + \frac{(i-2)(i-1)i(i+1)(2m+2i-3) - [(i-1)(i-2)]^2(2m+2i+1)}{8(2m+2i+1)(2m+2i-3)^3} \right\} \lambda^4 + \dots \end{aligned} \right.$$

wobei noch zu setzen ist:

$$\mu_i = \frac{8\pi^2 J}{h^2} (E_i - 2V_0); \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots; \quad \lambda^2 = \frac{16\pi^2 J V_0}{h^2}.$$

Hieraus können wir die Energieniveaus berechnen. Nehmen wir nun das erste Glied der Reihe, so bekommen wir für den ungestörten Fall ($V_0 = 0$)

$$\mu_i = \frac{8\pi^2 J}{h^2} E_i = (m+i)(m+i-1).$$

Setzt man nun

$$(43) \quad \begin{cases} m+i-1 = n \\ \text{daher} \quad m+i = n+1, \end{cases}$$

wobei $n - m = i - 1$ die Anzahl der Knoten ist, so folgt daraus

$$(44) \quad E_n = \frac{h^2}{8\pi^2 J} \cdot n(n+1),$$

also die Formel für die ungestörten Eigenwerte eines Rotators. Um auf die Bezeichnungen der später angewandten Störungsrechnung übergehen zu können, setzt man also

$$(44a) \quad i = n - m + 1, \quad \text{wobei} \quad m \leq n \quad \text{ist}$$

und durch Vergleich mit der späteren Rechnung sieht man, daß die erste Näherung der Störungsrechnung den ersten zwei Gliedern der Potenzreihe entspricht, die aus den Kettenbrüchen berechnet wurde. Jedes neue Glied in der Potenzreihe entspricht einer Erhöhung der Störungsrechnung um einen Grad.

Übersicht der Indizes und Quantenzahlen:

$n =$	0	1	2	3	4	5	6
$m = 0$	$i = 1$	2	3	4	5	6	7
$m = 1$	—	$i = 1$	2	3	4	5	6
$m = 2$	—	—	$i = 1$	2	3	4	5
$m = 3$	—	—	—	$i = 1$	2	3	4
$m = 4$	—	—	—	—	$i = 1$	2	3

Auf Grund obiger Tabelle wurden die Näherungen der Eigenwerte entwickelt:

$$(45) \left\{ \begin{array}{l} \text{Für } m = 0: \quad n = 0, \quad \mu_1 = -\frac{1}{3}\lambda^2 - \frac{2}{135}\lambda^4 - \frac{4}{3^2 \cdot 5 \cdot 7} \cdot \lambda^6 - \dots \\ \quad \quad \quad n = 1, \quad \mu_2 = 2 - \frac{3}{5}\lambda^2 + \dots \\ \quad \quad \quad n = 2, \quad \mu_3 = 6 - \frac{11}{21}\lambda^2 + \frac{94}{(21)^3}\lambda^4 - + \dots \\ \quad \quad \quad n = 3, \quad \mu_4 = 12 - \frac{23}{45}\lambda^2 + \dots \\ \quad \quad \quad n = 4, \quad \mu_5 = 20 - \frac{39}{77}\lambda^2 + \dots \\ \quad \quad \quad n = 5, \quad \mu_6 = 30 - \frac{59}{117}\lambda^2 + \dots \end{array} \right.$$

$$(46) \left\{ \begin{array}{l} m = 1: \quad n = 1, \quad \mu_1 = 2 - \frac{1}{2}\lambda^2 - \dots \\ \quad \quad \quad n = 2, \quad \mu_2 = 6 - \frac{3}{7}\lambda^2 - \dots \\ \quad \quad \quad n = 3, \quad \mu_3 = 12 - \frac{7}{15}\lambda^2 - \dots \\ \quad \quad \quad n = 4, \quad \mu_4 = 20 - \frac{37}{77}\lambda^2 - \dots \\ \quad \quad \quad n = 5, \quad \mu_5 = 30 - \frac{19}{39}\lambda^2 - \dots \\ \quad \quad \quad n = 6, \quad \mu_6 = 42 - \frac{27}{55}\lambda^2 - \dots \end{array} \right.$$

Bei Berücksichtigung der ersten zwei Glieder der Reihen erhält man folgende Energieniveaus:

$$m = 2, \quad n = 2; \quad \mu_1 = 6 - \frac{1}{7}\lambda^2 - \dots$$

Bei Berücksichtigung der ersten zwei Glieder der Reihen erhält man folgende Energieniveaus:

$$\begin{aligned}
 (47) \quad & \left. \begin{aligned}
 m = 0, \quad n = 0, \quad \mu_1 &= -\frac{1}{3} \lambda^2 - \frac{8\pi^2 J}{h^2} (E - 2V_0) \\
 &= -\frac{1}{3} \frac{16\pi^2 J V_0}{h^2}; \\
 E &= \frac{4}{3} V_0; \text{ und analog} \\
 n = 1, \quad E &= \frac{4}{5} V_0 + \frac{h^2}{4\pi^2 J}; \\
 n = 2, \quad E &= \frac{20}{21} V_0 + \frac{3h^2}{4\pi^2 J}; \\
 n = 3, \quad E &= \frac{44}{45} V_0 + \frac{3h^2}{2\pi^2 J}; \\
 n = 4, \quad E &= \frac{76}{77} V_0 + \frac{5h^2}{2\pi^2 J}; \\
 n = 5, \quad E &= \frac{116}{117} V_0 + \frac{15h^2}{4\pi^2 J};
 \end{aligned} \right\} \\
 & \begin{aligned}
 m = 1, \quad n = 1, \quad E &= \frac{8}{5} V_0 + \frac{h^2}{4\pi^2 J}; \\
 n = 2, \quad E &= \frac{8}{7} V_0 + \frac{3h^2}{4\pi^2 J}; \\
 n = 3, \quad E &= \frac{16}{15} V_0 + \frac{3h^2}{2\pi^2 J}; \\
 n = 4, \quad E &= \frac{80}{77} V_0 + \frac{5h^2}{2\pi^2 J}; \\
 n = 5, \quad E &= \frac{40}{39} V_0 + \frac{15h^2}{4\pi^2 J}; \\
 n = 6, \quad E &= \frac{56}{55} V_0 + \frac{21h^2}{2\pi^2 J};
 \end{aligned} \\
 & \begin{aligned}
 m = 2, \quad n = 2, \quad E &= \frac{12}{7} V_0 + \frac{3h^2}{4\pi^2 J}.
 \end{aligned}
 \end{aligned}$$

Durch Anwendung der Schrödingerschen Störungsrechnung auf Gl. (34) kann man nun auch die Eigenwerte bestimmen. Wir wollen diese Methode tatsächlich auf unser Problem anwenden, um den Unterschied besonders gut zu beleuchten. Das Störungsglied ist $V = V_0(1 - \cos 2\vartheta)$; die Eigenfunktionen des ungestörten Problems sind bekanntlich die Kugelflächenfunktionen:

$$(48) \quad \psi_{n,m} = N_{(n)}^{(m)} \cos \vartheta \left\{ (m\varphi) \cdot \underbrace{P_n^{(m)}(\cos \vartheta)}_x \right\}, \quad m \leq n; \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

wobei $N_n^{(m)}$ der Normierungsfaktor ist und $P_n^{(m)}(x)$ wie folgt definiert ist:

$$P_n^{(m)}(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x).$$

$P_n(x)$ sind die bekannten Legendrepolynome. Als Normierungsbedingung gilt:

$$(49) \quad N_n^{(m)} \cdot \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2 m \varphi}{\sin^2 m \varphi} d\varphi \int_0^\pi [P_n^{(m)}(\cos \vartheta)]^2 \sin \vartheta d\vartheta = 1,$$

woraus man $N_n^{(m)}$ erhält zu:

$$(50) \quad N_n^{(m)} = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{2\pi(n+m)!}}; \quad \text{für } m \neq 0.$$

Im Falle, daß $m = 0$ ist, erhält man

$$(51) \quad N_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}}.$$

Es gilt nun

$$E_{n,m} = E_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(m)}$$

als Ausgangsbeziehung für die Störungsrechnung. Für $n = 0$ (erster Eigenwert ist nicht entartet) erhält man:

$$\begin{aligned} \psi_{0,0} &= N_0^{(0)} \cdot P_0^{(0)}(\cos \vartheta); \quad N_0^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}; \\ \varepsilon_0^{(0)} &= (N_0^{(0)})^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta [P_0^{(0)}]^2 \sin \vartheta V_0 (1 - \cos 2\vartheta) \\ &= \frac{1}{4\pi} 2\pi V_0 2 \int_0^\pi d\vartheta [P_0^{(0)}(\cos \vartheta)]^2 \sin^3 \vartheta = V_0 K_0^{(0)}; \\ K_0^{(0)} &= \frac{4}{3}; \quad E_{0,0} = \varepsilon_0^{(0)} = \frac{4}{3} V_0. \end{aligned}$$

Um die bei der Rechnung auftretenden Integrale ermitteln zu können, benützen wir eine Beziehung aus der Abhandlung von Th. Sexl¹⁾:

$$(52) \quad \left\{ \begin{aligned} \int_0^\pi [P_n^{(m)}(\cos \vartheta)]^2 \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta &= \frac{2(n+m)!}{(n-m)!} \\ &\cdot \frac{2(n^2 - m^2) + 2n - 1}{(2n+3)(2n+1)(2n-1)} = J_n^{(m)}; \\ K_n^{(m)} &= \int_0^\pi [P_n^{(m)}]^2 \sin^3 \vartheta d\vartheta = \left(\frac{2}{2n+1} \right) \frac{(n+m)!}{(n-m)!} - J_n^{(m)}; \end{aligned} \right.$$

1) Th. Sexl, Ann. d. Phys. [5] 3. S. 573. 1929.

Für $n = 1$, $m = 0$ bekommt man

$$\begin{cases} N_1^{(0)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}; & \varepsilon_1^{(0)} = [N_1^{(0)}]^2 \\ \psi_{1,0} = N_1^{(0)} \cdot P_1^{(0)}; \\ E_{1,0} = E_1^{(0)} + \varepsilon_1^{(0)}; \end{cases} \begin{cases} \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta [P_1^{(0)}]^2 \sin \vartheta V_0 (1 - \cos 2\vartheta) \\ = 3 V_0 K_1^{(0)} = 3 V_0 \left(\frac{2}{3} - \frac{2}{5} \right) = \frac{4}{5} V_0; \\ E_{1,0} = \frac{4}{5} V_0 + \frac{h^2}{4\pi^2 J}; \end{cases}$$

Wir sehen durch Vergleich, daß diese Werte mit den von uns direkt bestimmten vollkommen übereinstimmen. Analog wie diese zwei Werte findet man alle anderen ebenfalls. Es ergab sich auch bei diesen vollkommene Übereinstimmung mit der früheren Rechnung, so daß wir dieselbe nicht einzeln behandeln wollen. Interessant ist diese Korrespondenz zwischen Störungsrechnung und Kettenbruchentwicklung, die einer Erhöhung der Störungsrechnung um einen Grad, eine Hinzunahme eines Gliedes unserer Entwicklung gegenüberstellt.

Einen Grenzfall bekommt man, indem man das Trägheitsmoment J beliebig groß werden läßt:

a) Der Oszillator als Grenzfall des Rotators: Für große Werte von λ ($\lambda^2 = \frac{16\pi^2 J V_0}{h^2}$), d. h. große Werte von J können wir eine asymptotische Formel für die Bestimmung der Eigenwerte angeben¹⁾. Man setzt zu diesem Zwecke in (39) $f = e^{i\xi} y_1(\xi)$ und $\xi = \cos x$.

Entwickelt man y_1 und μ_1 in Reihen von λ^{-1} , so bekommt man folgende Gleichungen:

$$\frac{d^2 y_1}{dx^2} + \{(2m+1) \cotg x - 2\lambda \sin x\} \frac{dy_1}{dx} + \{\mu_1 - 2(m+1)\lambda \cos x\} y_1 = 0,$$

wobei $\mu_1 = \mu + \lambda^2 - m \cdot (m+1)$ gesetzt ist. Nun gilt

$$y_1 = y_1^{(0)} + \lambda^{-1} y_1^{(1)} + \lambda^{-2} y_1^{(2)} + \dots$$

ferner

$$\mu_1 = \lambda \{\mu_1^{(0)} + \mu_1^{(1)} \lambda^{-1} + \dots\},$$

so daß bei Koeffizientenvergleichung:

$$(53) \begin{cases} \text{a) } 2 \sin x \frac{dy_1^{(0)}}{dx} + \{-\mu_1^{(0)} + (2m+1) \cos x\} y_1^{(0)} = 0, \\ \text{b) } \begin{cases} 2 \sin x \frac{dy_1^{(1)}}{dx} + \{-\mu_1^{(0)} + 2(m+1) \cos x\} y_1^{(1)} - \frac{d^2 y_1^{(0)}}{dx^2} \\ - (2m+1) \cotg x \frac{dy_1^{(0)}}{dx} - \mu_1^{(1)} y_1^{(0)} = 0 \quad \text{usw.} \end{cases} \end{cases}$$

1) Vgl. A. H. Wilson, a. a. O.

gilt. Die Lösung der Gl. (53a) erlangt man, wenn man

$$\mu_1^{(0)} = 2(r + m + 1)$$

annimmt und ist

$$(54) \quad y_1^{(0)} = \frac{\left(\sin \frac{x}{2}\right)^r}{\left(\cos \frac{x}{2}\right)^{2(m+1)+r}},$$

wobei r eine ganze Zahl ist.

Die Gl. (53b) wird nun

$$(55) \quad \left\{ \begin{aligned} & 2 \sin x \frac{dy_1^{(1)}}{dx} + \{-\mu_1^{(0)} + 2(m+1) \cos x\} y_1^{(1)} \\ & - \frac{1}{4} r(r+2m) \frac{\left[\sin \frac{x}{2}\right]^{r-2}}{\left[\cos \frac{x}{2}\right]^{2(m+1)+r}} \\ & - \{\mu_1^{(1)} + m(m+1)\} \frac{\left[\sin \frac{x}{2}\right]^r}{\left[\cos \frac{x}{2}\right]^{2(m+1)+r}} \\ & - \frac{1}{2} (2m+r+2) \frac{\left[\sin \frac{x}{2}\right]^r}{\left[\cos \frac{x}{2}\right]^{2(m+1)+r+2}} = 0 \quad \text{usw.} \end{aligned} \right.$$

Setzt man diese Entwicklung fort, indem man immer das Integral einer Differentialgleichung in die folgende Gleichung einsetzt, so bekommt man eine Folge von Gleichungen durch sukzessive Integration; es ergibt sich

$$\mu_1^{(1)} = -m(m+1).$$

Wir haben daher schließlich

$$\mu = -\lambda^2 + 2\lambda(m+r+1) + 0\left(\frac{1}{\lambda}\right),$$

wobei $0\left(\frac{1}{\lambda}\right)$ für $\lambda \rightarrow \infty$ gegen Null geht. Daraus erhalten wir

$$(56) \quad \left\{ \begin{aligned} \mu &= \frac{8\pi^2 J}{h^2} (E - 2V_0) \sim -\frac{16\pi^2 J V_0}{h^2} + 2 \frac{4\pi}{h} \sqrt{J \cdot V_0} (r+m+1) + \dots \\ E - 2V_0 &\sim -2V_0 + \frac{h}{\pi J} \sqrt{J V_0} (r+m+1) + \dots \\ E &\sim \frac{h}{\pi} \sqrt{\frac{V_0}{J}} (r+m+1) + \dots \quad r+m+1=n \\ E &\sim \frac{n h}{\pi} \sqrt{\frac{V_0}{J}}; \dots \end{aligned} \right.$$

Die Eigenwerte des Oszillators sind nun tatsächlich:

$$E_n = h \nu_0 \cdot n = h \cdot \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{V_0}{J}} \cdot n = \frac{n h}{\pi} \sqrt{\frac{V_0}{J}}.$$

Hierdurch ist die Übereinstimmung bewiesen. In unserem Falle bekommen wir die alte Plancksche Quantenbedingung (ohne Nullpunktsenergie), da wir ja den zweidimensionalen Oszillator (φ, ϑ) betrachten.

2. Die Gleichung des ersten Beispiels (39) spielt auch beim Zweizentrumproblem der Wellenmechanik eine wichtige Rolle. Dieses, welches im besonderen Falle das Problem des Wasserstoffmolekülions beinhaltet, führt bei Separation der Variablen in elliptischen Koordinaten auf zwei Differentialgleichungen, deren eine unsere Form (39) besitzt. In den Abhandlungen von Wilson, Baber und Hassé (a. a. O.) werden Eigenwerte aus der transzendenten Kettenbruchbedingung ermittelt, welche wir als Spezialfälle unserer allgemeinen Formel (42) darstellen können. Wir benutzen die erwähnte Formel und setzen darin zur Übereinstimmung mit der Terminologie von Wilson $m = n_3$. Es ergeben sich für $m = 0$:

$$i = 1 \text{ die Potenzreihen } \mu_1 = -\frac{\lambda^2}{3} - \frac{2}{3^2 \cdot 5} \lambda^4 - \dots$$

$$i = 3 \quad \dots \quad \mu_3 = 6 - \frac{11}{21} \lambda^2 + \frac{94}{(21)^3} \lambda^4 - \dots \text{ usw.},$$

welche mit den von Wilson gefundenen vollkommen übereinstimmen. Gleichzeitig sieht man, daß aus unserer Formel alle Wurzeln der Eigenwertbedingung zwanglos aufeinander folgen und eine Teilung in gerade und ungeradzahlige Potenzreihen nicht notwendig ist. Um auch die in der Abhandlung von Baber und Hassé angeführten Reihen zu verifizieren, setzen wir entsprechend ihrer Bezeichnungsweise:

$$\left. \begin{array}{l} \lambda \rightarrow p \\ \mu \rightarrow -A \end{array} \right\} \text{ und zur Abkürzung } B = A - p^2 + (m+2p) \cdot (m+1),$$

wodurch wir erhalten:

$$(57) \quad \left\{ \begin{array}{l} A_i = -(m+i-1) \cdot (m+i) \\ - \frac{(i-2)(i-1)(2m+2i+1) - i(i+1)(2m+2i-3)}{2(2m+2i-3)(2m+2i+1)} p^2 \\ - \left\{ \frac{(i-1)(i-2)(i-3)(i-4)}{16(2m+2i-3)^2(2m+2i-5)} - \frac{i(i+1)(i+2)(i+3)}{16(2m+2i+1)^2(2m+2i+3)} \right. \\ + \frac{[i(i+1)]^2(2m+2i-3) - (i-2)(i-1)i(i+1)(2m+2i+1)}{8(2m+2i+1)^2(2m+2i-3)} \\ \left. + \frac{(i-2)(i-1)i(i+1)(2m+2i-3) - [(i-1)(i-2)]^2(2m+2i+1)}{8(2m+2i+1)(2m+2i-3)^2} \right\} p^4 + \dots \end{array} \right.$$

und hieraus auch das $B_i = A_i - p^2 + (m+2p) \cdot (m+1)$. Spezialisieren wir diese allgemeine Formel für $i = 1$, so erhalten wir $i = 1$:

$$(58) \quad A_1 = -m(m+1) + \frac{1}{2m+3} p^2 + \frac{2(m+1)}{(2m+3)^2(2m+5)} p^4 + \dots$$

und

$$(59) \quad B_1 = 2(m+1)p - \frac{2(m+1)}{2m+3} p^3 + \frac{2(m+1)}{(2m+3)^2(2m+5)} p^5 + \dots$$

Für $i = 2$ erhält man allgemein:

$$(60) \quad \begin{cases} A_2 = -(m+1)(m+2) + \frac{3}{2m+5} p^2 + \frac{9m+24}{(2m+5)^2(2m+7)} p^4 + \dots \\ B_2 = -2(m+1) + 2(m+1)p - \frac{2(m+1)}{2m+5} p^3 \\ \quad + \frac{9m+24}{(2m+5)^2(2m+7)} p^5 + \dots \end{cases}$$

Aus diesen beiden Formeln bekommt man für $m = 0$ die Reihen von Baber und Hassé:

$$(61) \quad \begin{cases} A_1 = \frac{1}{3} p^2 + \frac{2}{3^2 \cdot 5} p^4 + \dots \\ B_1 = 2p - \frac{2}{3} p^3 + \frac{2}{3^2 \cdot 5} p^5 + \dots \end{cases}$$

und

$$(62) \quad \begin{cases} A_2 = -2 + \frac{3}{5} p^2 + \frac{24}{5^2 \cdot 7} p^4 + \dots \\ B_2 = -2 + 2p - \frac{2}{5} p^3 + \frac{24}{5^2 \cdot 7} p^5 + \dots \end{cases}$$

Die allgemeine Formel für $m = 0$ lautet:

$$(63) \quad \begin{cases} A_i = -i(i-1) - \frac{(i-2)(i-1)(2i+1) - i(i+1)(2i-3)}{2(2i-3)(2i+1)} p^2 \\ \quad - \left\{ \frac{(i-1)(i-2)(i-3)(i-4)}{16(2i-3)^2(2i-5)} - \frac{i(i+1)(i+2)(i+3)}{16(2i+1)^2(2i+3)} \right. \\ \quad + \frac{[i(i+1)]^2(2i-3) - (i-2)(i-1)i(i+1)(2i+1)}{8(2i+1)^2(2i-3)} \\ \quad \left. + \frac{(i-2)(i-1)i(i+1)(2i-3) - [(i-1)(i-2)]^2(2i+1)}{8(2i+1)(2i-3)^2} \right\} p^4 + \dots \\ B_i = A_i - p^2 + 2p. \end{cases}$$

Die Zahl der Anwendungsbeispiele könnte beliebig erweitert werden; überall wo die Methode der Störungsrechnung auf eine Differentialgleichung mit dreigliedriger Rekursionsformel angewandt wird, läßt sich das direkte Verfahren mittels Kettenbruchentwicklung erfolgreich anwenden.

Am Schlusse sei noch Herrn Prof. Sexl für die liebenswürdige Unterstützung herzlichst Dank gesagt.

Wien, Institut für theoretische Physik an der Universität.

(Eingegangen 27. April 1938)